

TESIS CARRERA DE MAESTRIA EN CIENCIAS
FÍSICAS

MONITOREANDO LA DINÁMICA DE MUCHOS
ESPINES CON ECOS DE REVERSIÓN TEMPORAL
POR RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Fabrizio Simón Lozano Negro

Dr. Gonzalo A. Alvarez
Director

Miembros del Jurado
Dr. Daniel Dominguez
Dr. Alejandro Kolton
Dr. Carlos Ramos

Noviembre de 2018

Laboratorio de Espectroscopia e Imágenes por Resonancia Magnética
Nuclear - Departamento de Física Médica - Centro Atómico
Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A Ioio y Oti...
para quienes
cualquier dedicatoria
seria poco.

Índice de símbolos

RMN: Resonancia magnética nuclear
CCM: Coherencias cuánticas múltiples
CI: Condición inicial
GE: Gaussiana-Exponencial

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Resumen	xi
Abstract	xiii
1. Introducción	1
2. Resonancia Magnética Nuclear	5
2.1. Resonancia Magnética Nuclear	5
2.2. Dinámica cuántica de un espín en un campo estático	7
2.2.1. Ecuaciones de movimiento para el valor medio	8
2.3. Tratamiento mecánico cuántico de un campo magnético oscilante	9
2.4. Detección de la señal	10
2.5. Ecos de espín	11
2.6. Dinámica de sistemas de espines	13
2.6.1. Operador densidad	13
2.6.2. Hamiltonianos de interacción de espín	15
3. Dinámica de sistemas de espines	17
3.1. Hamiltoniano XY	17
3.1.1. Transformación de Wigner-Jordan	18
3.2. Cadenas de espines	19
3.2.1. Sistema de dos espines	19
3.2.2. Sistema de 5 espines $1/2$	21
3.3. Conclusiones	23
4. Coherencias cuánticas múltiples	25
4.1. Definición, aplicaciones y propiedades	25
4.1.1. Enumeración y evolución de las coherencias cuánticas múltiples	26

4.1.2. Medición de coherencias cuánticas múltiples	28
4.2. Hamiltoniano Double Quantum	29
4.2.1. Resultados Analíticos previos de evoluciones de coherencias cuánticas múltiples	30
4.3. Evolución de un sistema de 5 espines $1/2$	30
4.3.1. Condición inicial	30
4.3.2. Interacción a primeros vecinos	31
4.3.3. Interacción de largo alcance	32
4.4. Evolución de un sistema de 6 espines $1/2$	33
4.5. Cluster size de un sistema de espines $1/2$	34
4.6. Conclusiones	36
5. Efectos de Decoherencia en Ecos de Reversión Temporal	37
5.1. Ecos de reversión temporal	40
5.1.1. Cadena de 5 espines $1/2$ con interacción a primeros vecinos . . .	42
5.1.2. Cadena de 6 espines $1/2$ con interacción a primeros vecinos . . .	48
5.1.3. Conclusiones	49
6. Ecos de reversión temporal: una herramienta para monitorear dinámicas de muchos cuerpos	51
6.1. Análisis de decaimientos	52
6.1.1. Análisis de efectos de tamaño finito: variando N	52
6.1.2. Sensitividad del decaimiento en función del tamaño inicial de espines correlacionados K_0	53
6.1.3. Regímenes dinámicos de decaimiento de los ecos	55
6.2. Análisis cuantitativo de las tasa de decaimientos de los distintos regímenes	59
6.2.1. Análisis de la tasa de decaimiento universal a $1/e$	59
6.3. Conectando el decaimiento de los ecos con los efectos de localización . .	66
6.3.1. Localización y decaimiento de los ecos	68
6.4. Comparación con datos experimentales	69
6.5. Conclusiones	73
7. Conclusiones	75
7.1. Resumen y Conclusiones	75
A. Simulaciones numéricas	81
A.1. Algoritmo de Trotter-Suzuki	82
A.2. Paralelismo cuántico como una herramienta para simular ensamble de espines	83

Índice de contenidos	ix
Bibliografía	87
Agradecimientos	91

Resumen

La dinámica de sistemas cuánticos de muchos cuerpos, es de gran importancia para el estudio de la física de la materia condensada como para el de moléculas muy grandes en química y biología, y es además un problema muy desafiante de resolver debido a su gran complejidad y efectos antintuitivos que contiene. En la actualidad, existen muchas preguntas abiertas para entender sus dinámicas, en particular relacionadas a efectos de localización, no termalización e irreversibilidad de estas dinámicas. Recientemente, se ha observado una nueva transición de fase en el comportamiento dinámico coherente de un sistema cuántico de muchos cuerpos en tres dimensiones, utilizando resonancia magnética nuclear en un sistema en estado sólido a temperatura ambiente [G.A. Álvarez, *et al.* Science **349**, 846 (2015)]. Se observó que perturbando el hamiltoniano que gobierna la dinámica coherente, por encima de un valor crítico, la extensión espacial de las superposiciones cuánticas creadas por la evolución se localizan. En este trabajo de maestría se estudiaron analíticamente y numéricamente dinámicas cuánticas en cadenas de espines emulando condiciones análogas a las de los experimentos realizados. Se simuló dinámicas perturbadas, y se las revirtieron en el tiempo con el hamiltoniano sin perturbar. Este fenómeno de reversión temporal, genera un eco cuya magnitud cuantifica los efectos de la perturbación y la irreversibilidad temporal de esta dinámica. Se realizaron diferentes simulaciones, con distintas perturbaciones y sistemas, con el fin de analizar la conexión entre el decaimiento del eco de la reversión temporal y los efectos de localización observados experimentalmente. Se implementó una técnica basada en el paralelismo cuántico para simular dinámicas de muchos espines, llegando a simular cadenas de $N = 18$ espines. Se observaron efectos de localización en las dinámicas simuladas análogos a los observados experimentalmente. Se identificaron distintos regímenes de crecimiento del tamaño de correlación de las superposiciones cuánticas creadas durante la evolución. Con estas simulaciones se reprodujeron además los comportamientos de los decaimientos de los ecos observados experimentalmente, comparando las tasas de decaimiento de los ecos en función de la perturbación. Se identificaron tres regímenes dinámicos que dictan las leyes de decaimiento de los ecos. Un decaimiento inicial cuadrático/gausiano en el tiempo, seguido por un régimen de decaimiento exponencial, terminando por último en un nuevo régimen de decaimiento gaussiano a tiempos largos. Los primeros dos regímenes son independientes del tamaño del sistema, dependen de

la perturbación y de la condición inicial del sistema y muestran ser dependientes de las leyes dinámicas que dictan el crecimiento del número de espines correlacionados. El tercer régimen, depende del tamaño del sistema, pero manifiesta converger a un régimen independiente del tamaño finito del sistema al extrapolar un crecimiento en N . Este régimen evidencia estar asociado a los efectos de localización observados en las simulaciones. Se llegó a una expresión analítica de la tasa de decoherencia para los primeros dos regímenes de decaimiento de los ecos en función de la perturbación y se utilizó para ajustar los datos experimentales. Observamos un excelente ajuste de las curvas experimentales. Estos resultados proveen una nueva herramienta para utilizar los ecos de reversión temporal para monitorear el comportamiento de la dinámica de muchos cuerpos, y servirán como trabajo a futuro para re-analizar y re-interpretar los datos experimentales observados en [G.A. Álvarez, *et al.* Science **349**, 846 (2015)]. En conjunto los resultados de esta tesis proporcionan una nueva visión sobre las posibilidades de controlar sistemas cuánticos grandes, necesarias para el desarrollo de nuevas tecnologías cuánticas, como los sensores cuánticos, y contribuyen al entendimiento de los orígenes de la irreversibilidad cuántica y los efectos de localización.

Palabras clave: RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR, DECOHERENCIA, SISTEMAS CUÁNTICOS DE MUCHOS CUERPOS, ECO DE LOSCHMIDT

Abstract

The dynamics of complex quantum systems, ubiquitous in condensed matter physics and in large molecules like proteins, is hard to be studied for understanding several observed non-intuitive effects. There are still many open questions, in particular, related to localization effects, non-thermalization and irreversibility of these dynamics.

Recently, a new kind of phase transition has been observed in the coherent dynamical behavior of a 3D many-body quantum system [G.A. Álvarez, *et al.* Science **349**, 846 (2015)]. It has been experimentally evidenced through quantum simulations using nuclear magnetic resonance (NMR) on a solid-state system.

A sudden quench on the interaction Hamiltonian dynamically induces correlations on the initially uncorrelated spins. The cluster-size of the correlated spins grows indefinitely as a function of time, and therefore, the spacial extension of the corresponding quantum superpositions that describes the states. Depending on the quench strength, a phase transition on the dynamical behavior is manifested leading to a localized dynamics for quench strengths lower than a critical value.

In this master's degree thesis, we studied analytically and numerically the quantum dynamics of spins chains under conditions analogous to those of the experiments carried out. We simulated a perturbed evolution, and then we reversed it back in time with the unperturbed control-Hamiltonian. This phenomenon of time reversal of the dynamics generates an echo whose magnitude quantifies the effects of the perturbation and the temporal irreversibility of the dynamics. Different numerical simulations were made, with different perturbations and systems, in order to analyze the connection between the decay of the time-reversal echoes and the localization effects observed experimentally. A technique based on quantum parallelism was implemented to simulate many-spin dynamics (up to $N = 18$ spins).

Localization effects were observed in simulated dynamics similar to those observed experimentally. Different regimes were identified on the growing evolution of the cluster-size of correlated spins. These simulations reproduced the experimental behavior of the echo's decays and their decays rates as a function of the perturbation. Three dynamical regimes were identified ruled by different echo's decays laws. An initial Quadratic/Gaussian decay, followed by an exponential decay regime and finally with a new Gaussian decay regime at long times. The first two regimes are indepen-

dent of the system-size, depend on the perturbation and the initial condition of system, and show to be dependent on dynamic laws that dictate the growth of the number of correlated spins.

The third regime depends on the system-size N , but it seems to converge to an size-independent regime when large values of N are extrapolated. This regime proves to be associated with Localization effects observed in the simulations. We developed an analytical expression of the decoherence rate for the first two eco's decay regimes as a function of the perturbation and it was used to adjust and reproduce the experimental data behavior. These results provide a new tool to use the time-reversal echoes to monitor the behavior of many-body dynamics, and it will serve to re-analyze and re-interpret the experimental data observed in [G.A. Álvarez, *et al.* Science **349**, 846 (2015)] as a future work. Altogether the results of this thesis provides a new insights on the possibilities to control large quantum systems necessary for the development of novel quantum technologies, such as quantum sensors, and it contributes to the understanding of the origins of quantum irreversibility and the localization effects.

Keywords: NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE, DECOHERENCE, QUANTUM MANY-BODY SYSTEM, LOSCHMIDT ECHO

Capítulo 1

Introducción

“Sometimes science is more art than science, Morty. Lot of people don’t get that.”

— Rick Sanchez.

Las tecnologías cuánticas son un campo actual en desarrollo y están comenzando a ser ampliamente aplicadas, para el almacenamiento, transmisión y procesamiento de información [1, 2] y hasta para mejorar la forma de encarar la medicina, por ejemplo a través de imágenes médicas con información microscópica [3–5]. En muchos de estos casos, los dispositivos cuánticos son más eficientes para realizar su tarea al aumentar el tamaño del sistema, es decir, con la incorporación de muchos cuerpos. Por esto, es necesario comprender como manipular sistemas cuánticos de muchos cuerpos para poder diseñar dispositivos cuánticos eficientes.

Los sistemas cuánticos de muchos cuerpos se hacen cada vez más frágiles a medida que su tamaño aumenta [6–9], y sus propiedades cuánticas se pierden rápidamente en el tiempo a través de un proceso denominado decoherencia [10]. La dinámica de una excitación inicial localizada puede interpretarse como procesos de “difusión cuántica”. Los procesos dinámicos de estos sistemas son muy complejos, y pueden manifestar efectos aún poco comprendidos de no termalización, de irreversibilidad de la dinámica cuántica y de localización de las excitaciones [11].

Los efectos de localización o deslocalización de estas dinámicas en el espacio de ciertos estados cuánticos, depende de parámetros como el desorden del sistema o el tipo de interacciones presentes. En el régimen en que éstos se encuentran localizados, estos sistemas pueden no llegar al equilibrio termodinámico reteniendo información acerca de su estado inicial a escalas de tiempo muy largas [11–13]. Este fenómeno, ligado a lo que se llama “localización de muchos cuerpos” (*many-body localization*), puede ser muy importante a la hora de transmitir, guardar y manipular información cuántica en estos estados [6, 14, 15]. Se ha observado, por ejemplo, que la degradación de la información es más probable cuanto mayor es el tamaño del sistema [6–9, 16]

y que los efectos de localización pueden limitar las distancias en las cuales el estado cuántico puede ser transmitido [6, 17–19].

Debido a que la dimensión del espacio de Hilbert de estos sistemas crece exponencialmente con el número de cuerpos involucrados, el tratamiento teórico-numérico generalizado se torna dificultoso. Por ello es necesario un control experimental de estos sistemas cuánticos con el fin de hacer simulaciones cuánticas para estudiar los mismos.

Se ha observado experimentalmente un nuevo tipo de transición de fase en el comportamiento dinámico de un sistema (3D) cuántico de muchos cuerpos [11]. Para esto se realizaron simulaciones cuánticas de forma experimental y controlada usando Resonancia Magnética Nuclear (RMN) en sistemas de estado sólido a temperatura ambiente [11]. Generando una dinámica que correlaciona a los espines nucleares, formado superposiciones cuánticas de muchos espines, se observó que el número de espines correlacionados crece indefinidamente en el tiempo y en consecuencia, la extensión en el espacio de las superposiciones cuánticas. Introduciendo una perturbación en el hamiltoniano que gobierna esta dinámica, el comportamiento sufre una transición de fase entre una “difusión” deslocalizada a una localizada en función de la intensidad de la perturbación [6, 11].

En estos estudios [6, 11] se buscó observar como afecta la dinámica generada por un hamiltoniano de control, las imperfecciones en el mismo y las interacciones con el ambiente. Para esto se evolucionó un sistema de espines con un hamiltoniano perturbado de manera controlada y se revirtió esta evolución con el hamiltoniano de control, es decir sin la perturbación, con el fin de estudiar los efectos generados por la perturbación.

Se observa también, al realizar estas evoluciones y reversiones, que la tasa decoherencia del sistema aumenta con la perturbación y con el número de espines involucrados [20].

El objetivo de esta tesis de maestría es determinar la existencia de una conexión entre los efectos de localización observados experimentalmente, y el comportamiento de la reversión temporal utilizada para estudiar estos efectos. De esta manera, la observación de los ecos de reversión temporal podría ser una herramienta para monitorear la dinámica compleja de sistemas de muchos cuerpos, y un testigo de los efectos de localización, convirtiéndose en una herramienta práctica ya que es sencilla de implementar experimentalmente.

En particular en esta tesis se busca determinar la dependencia de los tiempos de decoherencia en función de la perturbación para sistemas de pocos espines. Para esto se realizarán simulaciones computacionales de cadenas de N espines evolucionando a través del hamiltoniano perturbado y revirtiendo esta evolución a través del hamiltoniano de control.

En este trabajo de maestría se estudia analíticamente y numéricamente dinámicas

cuánticas en cadenas de espines emulando condiciones análogas a las de los experimentos realizados en [6, 11]. Se simulan dinámicas perturbadas, y se las revierte en el tiempo con el hamiltoniano sin perturbar. Este fenómeno de reversión temporal, genera un eco cuya magnitud cuantifica los efectos de la perturbación y la irreversibilidad temporal de esta dinámica, reflejando así el comportamiento de la dinámica con la que se correlacionan los espines. Esta amplitud se convierte entonces en una herramienta de monitoreo de la dinámica de espines, cuya ventaja radica en que la observación de un eco de reversión temporal es mucho más sencilla, que la aplicación de los métodos para determinar el número de espines correlacionados, reduciendo drásticamente el tiempo necesario para la ejecución de los experimentos. Se realizaron diferentes simulaciones, con distintas perturbaciones y sistemas, con el fin de demostrar la conexión entre el decaimiento del eco de la reversión temporal y los efectos de localización observados experimentalmente. De esta manera, este trabajo forma las bases para hacer del eco de reversión temporal una herramienta práctica para el monitoreo de la dinámica de un sistema de muchos cuerpos.

A continuación, en el capítulo 2 se exponen los conceptos básicos de RMN y de la dinámica cuántica de espines. En el capítulo 3 se estudia la dinámica de cadenas de N espines $1/2$ interactuantes para dos tipos de hamiltonianos relevantes para interpretar los experimentos. Para esto se repitieron cálculos analíticos de estas dinámicas para $N = 2$ y $N = 5$ bajo ciertas condiciones. Luego, se simulaban numéricamente estas dinámicas bajo las mismas condiciones, contrastándolas con los resultados analíticos, para verificar el funcionamiento de los algoritmos para extenderlas a nuevas condiciones análogas a las experimentales. En el capítulo 4 se introduce el concepto de coherencia cuántica múltiple, y su utilidad para determinar el número de espines correlacionados del sistema (*cluster-size*). Se muestran simulaciones para la dinámica de estas coherencias cuánticas para diferentes situaciones y se contrastan, en determinados casos, con soluciones analíticas. Se muestra el crecimiento del número de espines correlacionados para cadenas de espines bajo dos condiciones iniciales, una relevante en los experimentos y la otra para realizar simulaciones numéricas eficientes. Seguido a esto, en el capítulo 5, se detallan los resultados experimentales que motivan a este trabajo, se introducen los ecos de reversión temporal y se muestran simulaciones numéricas de evoluciones y reversiones temporales para cadenas de espines. Se reproducen condiciones que describen resultados experimentales previos, explorando diferentes condiciones iniciales y tiempos de evolución para desarrollar una estrategia robusta para modelar el sistema experimental. Basado en los resultados obtenidos en los capítulos 4 y 5, se determinan los sistemas y condiciones apropiadas para simular las dinámicas de muchos espines para interpretar los resultados experimentales. En función de esto, en el capítulo 6 se hace un análisis exhaustivo del comportamiento del eco de reversión temporal y del crecimiento del *cluster-size* en función del tiempo, variando el tamaño de la

cadena simulada (N), el número de espines correlacionados en la condición inicial (K_0) y la intensidad de la perturbación introducida. Se muestran los diferentes regímenes dinámicos observados, y como estos correlacionan las leyes de decaimiento de los ecos con las leyes que describen la dinámica del número de los espines correlacionados. Se analizan al final algunos datos experimentales y comparan con los resultados predichos con las simulaciones. Por último en el capítulo 7 se resumen los resultados, dan las conclusiones y definen las preguntas abiertas generadas con este trabajo.

Capítulo 2

Resonancia Magnética Nuclear

“Have you noticed how nobody works anymore and everybody does something artistic?”

— Cheyenne—This must be the place

2.1. Resonancia Magnética Nuclear

La resonancia magnética nuclear (RMN) es una técnica experimental que permite el estudio de los espines nucleares, su entorno y su dinámica, a través de la interacción con campos magnéticos externos. La misma ha sido aplicada en numerosas situaciones como la obtención de imágenes médicas, determinación de la estructura de compuestos químicos, determinación de purezas y diferentes aplicaciones en la industria e investigación [21–23]. Es un campo muy activo tanto para mejorar, como para desarrollar nuevas aplicaciones. Unos de estos campos más nuevos, son las computaciones y simulaciones cuánticas que son de interés para este trabajo [1, 3, 24–26]. En el marco de estas últimas tecnologías han surgido diferentes preguntas a contestar y dificultades a superar, como por ejemplo la decoherencia de sistemas cuánticos de muchos cuerpos [1, 7, 27]. Esto ha conducido a las técnicas experimentales nombradas en la introducción para estudiar la dinámica de muchos cuerpos [6, 11] y las cuales queremos explotar para comprender los resultados experimentales que se derivaron.

En este capítulo se introducirán los conceptos básicos referentes a la técnica de RMN y a las dinámicas cuánticas, ya que son la base de los experimentos que queremos explicar.

Principios básicos

El fenómeno de resonancia magnética es encontrado en sistemas que poseen momento angular de espín y momento magnético. Consideremos un sistema de N espines

idénticos no interactuales. Bajo estas condiciones basta analizar uno de ellos. En presencia de un campo magnético externo (\mathbf{H}_0) el sistema adquiere una energía debida a la interacción dada por el hamiltoniano

$$\mathcal{H}_z = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H}_0, \quad (2.1)$$

donde $\boldsymbol{\mu}$ es el operador momento magnético del núcleo [28]. Este hamiltoniano se denomina Hamiltoniano Zeeman, y a la energía correspondiente, energía Zeeman. El momento magnético es proporcional al momento angular de espín, $\boldsymbol{\mu} = \gamma \hbar \mathbf{I}$, siendo el factor giromagnético γ , una característica particular de cada núcleo. El operador de espín \mathbf{I} está caracterizado por los autovalores de \mathbf{I}^2 , $I(I+1)$, donde I es un entero o semi-entero, y los autovalores de alguna de sus componentes, por ejemplo I_z , que son iguales a $m = I, I-1, \dots, -I+1, -I$ [28]. Si consideramos $\mathbf{H}_0 = H_0 \hat{z}$, el Hamiltoniano Zeeman (2.1) se escribe como

$$\mathcal{H}_z = -\hbar \gamma H_0 I_z, \quad (2.2)$$

siendo los autovalores (autoenergías) de este Hamiltoniano

$$E_m = -\hbar \gamma H_0 m, \quad m = I, I-1, \dots, -I+1, -I. \quad (2.3)$$

Para detectar la presencia de un espectro de energías discreto, se requiere tener una interacción capaz de producir transiciones entre dichos niveles. Dicha interacción puede ser dependiente del tiempo con una frecuencia angular tal que $\hbar \omega \sim \Delta E$, donde ΔE es la diferencia de energía entre los niveles involucrados en la transición [28]. En RMN se utilizan campos magnéticos alternos aplicados perpendicularmente al campo externo (\mathbf{H}_0) para producir ésta transición.

Consideremos un campo magnético alterno de frecuencia angular ω y amplitud H_1 aplicado en la dirección \hat{x} . Debemos considerar entonces un termino en el Hamiltoniano de la forma

$$H_{\text{rf}} = -\gamma H_1 I_x \cos(\omega t). \quad (2.4)$$

Esta interacción produce transiciones entre estados cuyo número cuántico m difiere en uno. La transición se producirá entonces, siempre y cuando $\hbar \omega \simeq \Delta E = \hbar \gamma H_0$. La frecuencia $\omega_0 = \gamma H_0$ se denomina frecuencia de Larmor, siendo esta del orden de los MHz (radio frecuencia, rf) para campos magnéticos externos de algunos teslas y factores giromagnéticos correspondientes a los núcleos atómicos.

Volviendo al conjunto de N espines que constituyen la muestra macroscópica, y considerando al sistema en equilibrio térmico, la ocupación de cada nivel E_m esta dada por la distribución de Boltzmann. Esto conduce a una magnetización neta en la dirección del campo magnético externo. La aplicación de campos de radio frecuencia durante

un cierto tiempo produce una modificación de la población de equilibrio (debido a las transiciones). Estudiando la forma en que el sistema recupera el equilibrio termodinámico brinda información del sistema y es lo que permite muchas de las aplicaciones nombradas anteriormente.

2.2. Dinámica cuántica de un espín en un campo estático

Hemos visto que la descripción cuántica de un espín en un campo estático da energías en términos del número cuántico m (2.3), el cual es autovalor de la componente de espín I_z paralela al campo estático aplicado. Las correspondientes autofunciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo las denotamos $u_{I,m}$. La solución dependiente del tiempo correspondiente a un valor particular de m será entonces

$$\Psi_{I,m}(t) = u_{I,m} e^{-(i/\hbar)E_m t}, \quad (2.5)$$

y la solución más general

$$\Psi(t) = \sum_{m=-I}^{+I} c_m u_{I,m} e^{-(i/\hbar)E_m t}, \quad (2.6)$$

donde c_m son constantes complejas. Calculando el valor medio del operador magnetización $\mu_x = \gamma \hbar I_x$, obtenemos

$$\langle \mu_x(t) \rangle = \sum_{m,m'} \gamma \hbar c_m \langle m' | I_x | m \rangle e^{(i/\hbar)(E'_m - E_m)t}, \quad (2.7)$$

donde $\langle m' | I_x | m \rangle = \int u_{I,m'}^* I_x u_{I,m} d\tau$ es un elemento de matriz independiente del tiempo. Estos elementos son cero a menos que $m - m' = \pm 1$, y esto implica que todos los términos en la Ec. (2.7) tienen una frecuencia angular igual a $\pm \gamma H_0$. Es decir, el valor medio oscila en el tiempo con la frecuencia de precesión clásica [28].

Para entender el significado físico de esta expresión consideremos la forma que toma para un espín $\frac{1}{2}$. Usando el hecho que los elementos diagonales de I_x son cero y que $\langle \frac{1}{2} | I_x | -\frac{1}{2} \rangle$ es el complejo conjugado de $\langle -\frac{1}{2} | I_x | \frac{1}{2} \rangle$ (operador hermítico), tenemos

$$\langle \mu_x(t) \rangle = 2\gamma \hbar \text{Re}\{(c_{1/2}^* c_{-1/2}) \langle \frac{1}{2} | I_x | -\frac{1}{2} \rangle e^{i\omega_0 t}\} \quad (2.8)$$

$$= \gamma \hbar \text{Re}\{(c_{1/2}^* c_{-1/2}) e^{i\omega_0 t}\} = \gamma \hbar a b \cos(\alpha - \beta + \omega_0 t), \quad (2.9)$$

donde a, b, α, β vienen dados por $c_{1/2} = a e^{i\alpha}$ y $c_{-1/2} = a e^{i\beta}$.

Análogamente se encuentra

$$\langle \mu_y(t) \rangle = -\gamma \hbar a b \sin(\alpha - \beta + \omega_0 t), \quad (2.10)$$

$$\langle \mu_z(t) \rangle = -\gamma \hbar (a^2 - b^2)/2, \quad (2.11)$$

donde se observa que $\langle \mu_x(t) \rangle$ y $\langle \mu_y(t) \rangle$ oscilan con la frecuencia de Larmor, pero $\langle \mu_z \rangle$ es independiente del tiempo [28].

2.2.1. Ecuaciones de movimiento para el valor medio

La evolución de los valores medios puede entenderse a partir de la evolución de los estados a través de la ecuación de Schrödinger (representación de Schrödinger) ó a través de la evolución de los operadores (representación de Heisenberg). En esta última representación, la evolución de un operador F viene dada por la siguiente ecuación

$$\frac{dF^H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, F^H] + \left(\frac{dF^S}{dt} \right)^H, \quad (2.12)$$

donde los supraíndices S y H denotan la representación utilizada en cada caso [29].

Los operadores utilizados a continuación no tienen una dependencia temporal en la representación de Schrödinger por lo cual el término $\frac{dF^S}{dt}$ se anula.

La evolución entonces del operador I_x a través de un hamiltoniano $\mathcal{H} = -\hbar \gamma H I_z$, viene dada por

$$\frac{dI_x^H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, I_x^H] \quad (2.13)$$

$$= \gamma H I_y^H, \quad (2.14)$$

y vectorialmente por

$$\frac{d\mathbf{I}^H}{dt} = \gamma \mathbf{I}^H \times \mathbf{H}. \quad (2.15)$$

Tomando el valor medio sobre el estado inicial $|\psi_0\rangle$, y teniendo en cuenta la transformación entre la representación de Schrödinger y Heisenberg dadas por el operador de evolución U tenemos

$$\frac{d\langle \psi_0 | \mathbf{I}^H | \psi_0 \rangle}{dt} = \gamma \langle \psi_0 | \mathbf{I}^H | \psi_0 \rangle \times \mathbf{H}, \quad (2.16)$$

$$\frac{d\langle \psi_0 | U^\dagger \mathbf{I}^S U | \psi_0 \rangle}{dt} = \gamma \langle \psi_0 | U^\dagger \mathbf{I}^S U | \psi_0 \rangle \times \mathbf{H}, \quad (2.17)$$

$$\frac{d\langle \psi(t) | \mathbf{I}^S | \psi(t) \rangle}{dt} = \gamma \langle \psi(t) | \mathbf{I}^S | \psi(t) \rangle \times \mathbf{H}, \quad (2.18)$$

$$\frac{d\langle \boldsymbol{\mu} \rangle}{dt} = \gamma \langle \boldsymbol{\mu} \rangle \times \mathbf{H}. \quad (2.19)$$

Esta ecuación es justamente la ecuación clásica para la dinámica de la magnetización [28]. En particular resolviendo el sistema de ecuaciones para $\mathbf{H} = H_0 \mathbf{k}$ se obtiene el resultado mostrado en la sección anterior (Ecs. (2.9)-(2.11)).

2.3. Tratamiento mecánico cuántico de un campo magnético oscilante

Consideremos el campo $\mathbf{H}(t)$ compuesto por H_1 , el cual rota con velocidad angular ω_z alrededor del eje z , y el campo estático $H_0 \mathbf{k}$, es decir,

$$\mathbf{H}(t) = iH_1 \cos(\omega_z t) + jH_1 \sin(\omega_z t) + \mathbf{k}H_0. \quad (2.20)$$

La ecuación de Schrödinger se escribe entonces

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H} \Psi = -\gamma \hbar [H_0 I_z + H_1 (I_x \cos(\omega_z t) + I_y \sin(\omega_z t))] \Psi, \quad (2.21)$$

donde el hamiltoniano anterior se puede escribir como $\mathcal{H} = -\gamma \hbar (H_0 I_z + H_1 e^{-i\omega_z t I_z} I_x e^{i\omega_z t I_z})$. Esto nos motiva a definir $\Psi' = e^{i\omega_z t I_z} \Psi$ y, reemplazando estas dos expresiones junto a $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega_z I_z e^{-i\omega_z t I_z} \Psi' + e^{i\omega_z t I_z} \frac{\partial \Psi'}{\partial t}$ en la ecuación (2.21) se obtiene

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = -\gamma \hbar [(H_0 + \omega_z / \gamma) I_z + H_1 I_x] \Psi'. \quad (2.22)$$

La dependencia temporal del campo magnético ha sido eliminada, y se observa una dependencia “efectiva” con un campo estático $iH_1 + \mathbf{k}(H_0 + \omega_z / \gamma)$. La resonancia ocurre cuando $H_0 = -\omega_z / \gamma$, y bajo esta condición el valor medio de la magnetización en z viene dado por

$$\langle \mu_z(t) \rangle = -\langle \mu_y(0) \rangle \sin(\gamma H_1 t) + \langle \mu_z(0) \rangle \cos(\gamma H_1 t). \quad (2.23)$$

Considerando que la magnetización inicial media en el eje y es igual a cero, tenemos $\langle \mu_z(t) \rangle = \langle \mu_z(0) \rangle \cos(\gamma H_1 t)$. Hemos obtenido entonces, que la magnetización en el sistema de referencia rotante oscila alrededor de H_1 a una frecuencia angular γH_1 [28].

Esta situación se puede pensar a partir de la ecuación (2.19), donde el campo efectivo conduce a que el valor medio de la magnetización (en el sistema rotante) rote alrededor del eje x . Luego de un tiempo $t_{\pi/2} = \frac{\pi}{2\gamma H_1}$, el valor medio de la magnetización se encontrará sobre el eje y si inicialmente estaba en el eje z . Cuando se aplica un campo magnético oscilante durante un tiempo $t_{\pi/2}$ con el fin de producir este efecto, se dice que se aplicó un pulso $\pi/2$.

2.4. Detección de la señal

La magnetización inicialmente se encuentra en equilibrio térmico en la dirección z (debido al campo H_0), es decir, $\mathbf{M}_0 = M_0 \mathbf{k}$. Esta magnetización inicial es normalmente rotada al plano xy mediante un pulso $\pi/2$. Es decir se aplica un pulso de campo magnético oscilante a la frecuencia de resonancia en la dirección perpendicular de la magnetización, resultando entonces al finalizar el pulso una magnetización transversal $\mathbf{M}_{xy} = M_0(-\sin(\theta)\mathbf{i} + \cos(\theta)\mathbf{j})$. Esta magnetización luego de apagado el campo oscilante, precesará alrededor del eje z . La variación de flujo magnético provocado por esta precesión es detectada (en forma de una *fem*) por una bobina que rodea la muestra. Esta señal, llamada señal inducida por decaimiento libre (FID, por sus siglas en ingles), oscila decayendo en el tiempo al ser un estado de no-equilibrio. Al realizar la transformada de Fourier de esta señal se obtiene un espectro centrado en ω_0 con un ancho relacionado con el tiempo de relajación de la FID. De encontrarse núcleos iguales en la muestra, pero con distinto entorno (posiciones diferentes en la molécula, enlaces diferentes, etc.) se vería reflejado en distintas frecuencias de precesión y por ende varias líneas de resonancia [28].

En las secciones anteriores, se consideró que la magnetización oscila indefinidamente en el tiempo, es decir, sin atenuación. En los sistemas reales esta oscilación decae en el tiempo debido a que las poblaciones de espines tienden a la población de equilibrio. Bloch atacó este problema desde un punto de vista fenomenológico, en donde introdujo dos constantes de relajación [30]. La constante de tiempo T_1 , asociada a la relajación longitudinal, la cual tiene en cuenta la variación de las poblaciones hacia el equilibrio térmico y la constante de tiempo T_2 o constante de tiempo de relajación transversal, asociada a la pérdida de coherencias debido a las interacciones espín-espín.

Añadiendo estas consideraciones a las ecuaciones de movimiento obtenidas anteriormente se obtienen las siguientes ecuaciones para la magnetización total M en cada dirección, conocidas como ecuaciones de Bloch,

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H})_z - \frac{M_z - M_0}{T_1}, \quad (2.24)$$

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H})_x - \frac{M_x}{T_2}, \quad (2.25)$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma(\mathbf{M} \times \mathbf{H})_y - \frac{M_y}{T_2}. \quad (2.26)$$

De la solución de estas ecuaciones se deduce que el espectro de la magnetización medido es Lorentziano, donde su parte real se denomina Lorentziana de absorción y su parte imaginaria Lorentziana de dispersión [28].

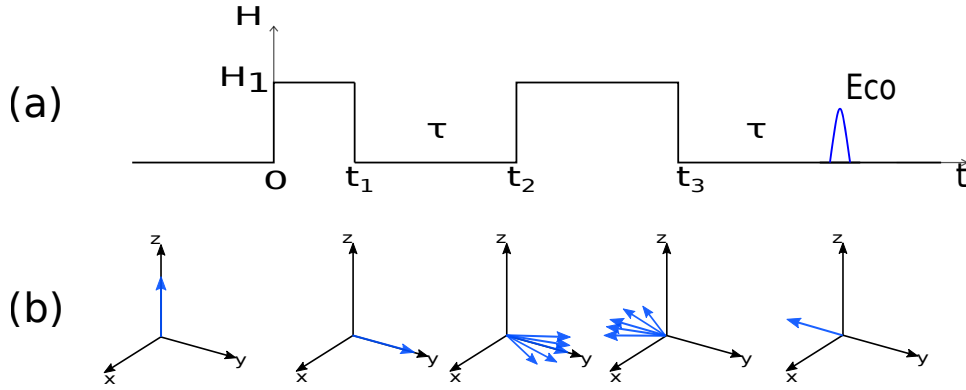


Figura 2.1: (a) Amplitud del campo magnético oscilante H en función del tiempo t (escala pictórica, ya que usualmente, $\tau \gg t_1$ y $\tau \gg t_3 - t_2$) utilizado para refocalizar la magnetización con un eco de espín. (b) Interpretación clásica de los efectos provocados por la secuencia mostrada en (a) sobre los momentos magnéticos involucrados.

2.5. Ecos de espín

Como se vió en la sección anterior, la señal observada luego del pulso de excitación decae con el tiempo debido a la relajación de los espines y a efectos del ambiente (ya sea inhomogeneidades del campo magnético o interacciones espín-espín). La pérdida de magnetización debida a la relajación de los espines puede ser revertida a partir de un pulso de inversión de espines (π *inversion pulse*) siempre que esta relajación sea inducida por inhomogeneidades estáticas de campo magnético.

Si bien hemos visto que los valores medios de la magnetización obedecen las ecuaciones clásicas, y que podrían ser utilizadas para observar el eco de espín, se optó por un acercamiento cuántico a modo de introducción a manipulaciones y reversiones más generales que se discutirán en los capítulos 4 y 5.

Consideremos la secuencia de eventos mostrados en la figura 2.1-a, en donde se muestra H_1 en función del tiempo. El campo de radio frecuencia (RF, de frecuencia ω) H_1 , es encendido desde $t = 0$ hasta t_1 produciendo un pulso $\pi/2$. De t_2 a t_3 el mismo campo es aplicado produciendo en este caso un pulso π , mientras que entre estos dos pulsos los espines precesan libremente [28].

La función de onda del sistema evoluciona a través de la ecuación de Schrödinger en el sistema rotante $-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = \mathcal{H}' \Psi'$. En este caso $\mathcal{H}'(t) = -\gamma \hbar [h_0 I_z + H_1 I_x]$, donde $h_0 \neq 0$ representa la inhomogeneidad o un *offset* particular del campo.

En vista de que la dependencia temporal de \mathcal{H}' es solamente producto de la aplicación de pulsos H_1 , podemos resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en cada uno de los intervalos e imponer la continuidad de la función de onda entre intervalos.

Para hacer esto vamos a suponer que durante los pulsos $\mathcal{H}' = -\gamma \hbar H_1 I_x$, es decir $H_1 \gg h_0$ para todos los espines. Entre los pulsos, el hamiltoniano es directamente igual a $-\gamma \hbar h_0 I_z$.

Para el siguiente análisis es conveniente definir $X(\theta) = e^{i\theta I_x}$, al operador de rotación alrededor del eje x , y $T(h_0, t) = e^{i\gamma h_0 t I_z}$ al operador de evolución entre pulsos.

La funciones de onda en t_1 y t_2 serán $\Psi'(t_1) = X(\pi/2)\Psi'(0)$ y $\Psi'(t_2) = T(h_0, \tau = (t_2 - t_1))X(\pi/2)\Psi'(0)$. Para tiempos $t > t_3$

$$\Psi'(t) = T(h_0, \tau = (t - \tau))X(\pi)T(h_0, \tau = (t_2 - t_1))X(\pi/2)\Psi'(0). \quad (2.27)$$

Calculamos entonces $\langle \mu_y \rangle$, en este caso debemos tener en cuenta que hay un número (N) macroscópico de espines con alguna distribución de h_0 , $p(h_0)$:

$$\langle \mu_{y_{\text{total}}}(t) \rangle = N \int p(h_0) dh_0 \int \Psi'(h_0, t) I_y \Psi'(h_0, t) d\tau_I. \quad (2.28)$$

Expresando $\Psi'(h_0, t)$ en términos de $X(\theta)$ y $T(h_0, t)$, y evaluando en $t = 2\tau$, llegamos a la expresión

$$\langle \mu_{y_{\text{total}}(t=2\tau)} \rangle = -N \int \Psi'(0) X^{-1}(\pi/2) I_y X(\pi/2) \Psi'(0) d\tau_I = -N \langle I_z(0^-) \rangle, \quad (2.29)$$

donde 0^- hace referencia al tiempo justo antes de aplicar el pulso en $t = 0$. Notemos que el signo menos indica que el eco se forma sobre el semieje negativo y . Análogamente se observa que $\langle \mu_x \rangle(2\tau) = 0$ [28].

Para interpretar clásicamente este efecto observemos la figura 2.1-b. Inicialmente los momentos magnéticos se encuentran en la dirección z . Al aplicar el primer pulso $(\pi/2)$ los mismos rotan al plano xy donde luego, debido a la presencia de inhomogeneidades, comienzan a rotar alrededor del eje z con frecuencias diferentes. Al aplicar el segundo pulso, (π) , los vectores magnetización se invierten. Esto es equivalente a pensar que la dirección de rotación cambia, y por ende luego de un tiempo τ la magnetización fue refocalizada.

Cuánticamente podemos pensar que el pulso π cambio el hamiltoniano anterior por un nuevo hamiltoniano que solo difiere del primero en el signo. Este efecto se puede generalizar y decir que el efecto de pulsos es equivalente a una situación en la que no hay pulsos pero el hamiltoniano cambió. Este concepto ha sido muy útil en resonancia magnética, donde se han utilizado secuencias de pulsos para lograr algún hamiltoniano efectivo particular como por ejemplo el hamiltoniano *double quantum*, el cual ha sido utilizado en los experimentos a analizar [31] y será discutido en los capítulos 4 y 5.

En este caso, la combinación de ambos hamiltonianos a un tiempo $t = 2\tau$, ha eliminado el efecto de las inhomogeneidades del campo magnético en el hamiltoniano, y de la misma manera puede ser usado para eliminar cualquier interacción equivalente a estas inhomogeneidades. La refocalización de la magnetización puede ser considerada entonces como una reversión temporal. Si hay presentes otro tipos de inhomogeneidades, como por ejemplo interacciones con un ambiente que fluctúa en el tiempo, el eco

se verá afectado, no teniendo la amplitud inicial, incluso llegando a no observarse si el tiempo transcurrido entre el pulso de excitación y el pulso de reversión es suficientemente grande. Esto último se debe a que en este caso la secuencia de pulsos no es equivalente al hamiltoniano efectivo de evolución solo con el signo opuesto.

El concepto de refocalización o eco puede ser generalizado al eco de Loschmidt [32], como el proceso de recuperación del estado inicial mediante la evolución a través de un hamiltoniano con signo cambiado. Es decir, luego de una evolución mediante un hamiltoniano \mathcal{H}_1 un tiempo t se revierte la dinámica mediante una evolución a través de \mathcal{H}_2 con el fin de recuperar el estado inicial a un tiempo $2t$. Como es esperable, la recuperación sólo será perfecta cuando $\mathcal{H}_1 = -\mathcal{H}_2$, sin embargo esto no es posible de conseguir en sistemas reales y siempre aparece una diferencia entre ambas evoluciones debido a interacciones no deseadas ó a imperfecciones en la generación de dichos hamiltonianos.

Matemáticamente el eco de Loschmidt es definido a partir de la siguiente ecuación

$$M(t) = |\langle \psi_0 | e^{i\mathcal{H}_2 t/\hbar} e^{-i\mathcal{H}_1 t/\hbar} | \psi_0 \rangle|^2, \quad (2.30)$$

donde se asumió que los hamiltonianos no son dependientes del tiempo [32]. La ecuación (2.30) puede ser interpretada como el solapamiento de las funciones de onda resultantes de evolucionar $|\psi_0\rangle$ mediante \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 , lo cual nos da una medida de la sensibilidad de la evolución a perturbaciones y cuantifica el grado de irreversibilidad provocada por las perturbaciones.

2.6. Dinámica de sistemas de espines

Hemos visto que la dinámica de espines aislados puede verse como el movimiento clásico del vector magnetización (en valor medio en este caso, Ec. (2.19)). Para describir sistemas de espines acoplados donde no se conoce a priori la función de onda del sistema, es necesario en cambio recurrir a otro formalismo de la mecánica cuántica.

2.6.1. Operador densidad

Supongamos que conocemos el vector de onda perteneciente al espacio de Hilbert que describe nuestro sistema. En este caso, se dice que el sistema esta en un *estado puro*, es decir, puede describirse mediante un único vector de onda $|\psi(t)\rangle$ y el operador densidad viene dado por

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (2.31)$$

En caso contrario, si no podemos describir al sistema mediante un único vector de onda, si no que conocemos las probabilidades de encontrar al sistema en diferentes

estados, se dice que el sistema se encuentra en un *estado mixto* y el operador densidad viene dado por

$$\rho(t) = \sum_i p_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|. \quad (2.32)$$

Las p_i son las probabilidades de que el sistema se encuentre en los estados $\psi_i(t)$ [33].

Escribiendo el operador densidad en una base de autoestados del Hamiltoniano, tenemos que los elementos diagonales $\rho_{rr} = \langle r|\rho(t)|r\rangle = \overline{|c_r(t)|^2} = P_r$ son iguales a la probabilidad de encontrar al sistema en el autoestado $|r\rangle$. Es decir P_r es la población del estado r . Por otro lado, los elementos no diagonales de la matriz densidad $\rho_{rs} = \langle r|\rho(t)|s\rangle = \overline{c_r(t)c_s^*(t)}$ indican una superposición coherente de autoestados $|r\rangle$ y $|s\rangle$ [33].

A dichas superposiciones coherentes se las llama *coherencias* y pueden ser asociadas a transiciones entre dos estados $|r\rangle$ y $|s\rangle$.

De ser posible especificar la matriz densidad en términos de algún operador conocido se puede trabajar directamente en términos de éste sin requerir a funciones de onda. Para una situación de equilibrio térmico, por ejemplo, las probabilidades p_i vienen dadas por la distribución de Boltzmann y las funciones por los correspondientes autoestados de \mathcal{H} . En esta situación, la matriz densidad viene dada por

$$\rho_0 = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\mathcal{H}/(k_b T)}, \quad (2.33)$$

donde $\mathcal{Z} = \text{Tr}[e^{-\mathcal{H}/(k_b T)}]$ es la función de partición, k_b la constante de Boltzmann y T la temperatura del sistema.

Ecuación de movimiento y valores de expectación

Puede deducirse a través de la ecuación de Schrödinger que la ecuación de movimiento del operador densidad es

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}(t), \rho(t)], \quad (2.34)$$

conocida como *Ecuación de Liouville-von Neumann*. Su solución formal es $\rho(t) = U(t)\rho_0 U^{-1}(t)$, siendo $U = T e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t') dt'}$ el operador de evolución temporal, con T el operador de orden temporal de Dyson [29].

El valor de expectación de un observable A viene dado por

$$\langle A \rangle = \sum_{i=0}^n p_n \langle \psi_i(t) | A | \psi_i(t) \rangle, \quad (2.35)$$

y utilizando el operador densidad expresado en una base $|r\rangle$,

$$\langle A \rangle = \sum_r \sum_s \sum_{i=0}^n p_n c_n^{r*}(t) c_n^{s*}(t) \langle r|A|s \rangle = \sum_r \sum_s \rho_{sr}(t) A_{rs}, \quad (2.36)$$

quedando finalmente $\langle A \rangle = \text{Tr}[A\rho(t)]$ [33].

2.6.2. Hamiltonianos de interacción de espín

En general, el hamiltoniano de espín en un experimento de resonancia magnética nuclear puede escribirse de la siguiente manera

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_z + \mathcal{H}_{rf} + \mathcal{H}_{cs} + \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_J, \quad (2.37)$$

donde \mathcal{H}_z y \mathcal{H}_{rf} son el acoplamiento con el campo \mathbf{H}_0 y el acoplamiento con el campo de radio frecuencia vistos en las secciones anteriores. \mathcal{H}_{cs} describe el apantallamiento electrónico de los núcleos, \mathcal{H}_d la interacción dipolar entre espines y \mathcal{H}_J la interacción entre núcleos a través de enlaces electrónicos. A continuación solo consideraremos interacciones provenientes de los términos \mathcal{H}_z , \mathcal{H}_{rf} y \mathcal{H}_d .

Hamiltoniano dipolar

El hamiltoniano asociado a este tipo de interacción viene dado por la siguiente ecuación

$$\mathcal{H}_d/\hbar = \sum_{k<l} b_{kl} \mathbf{I}_k \cdot \mathbf{I}_l - \frac{3}{r_{kl}^3} (\mathbf{I}_k \cdot \mathbf{r}_{kl})(\mathbf{I}_l \cdot \mathbf{r}_{kl}), \quad (2.38)$$

donde $b_{kl} = \mu_0 \gamma_k \gamma_l \hbar / (4\pi r_{kl}^3)$, siendo γ_i el factor giromagnético del espín i y \mathbf{r}_{kl} el vector separación entre espines k y l . Las energías involucradas en este acople son notablemente menores que las correspondientes al acoplamiento Zeeman. Entonces, para campos \mathbf{H}_0 altos podemos despreciar los términos no seculares, es decir los términos del hamiltoniano dipolar que no conmutan con \mathcal{H}_Z [34]. Se tiene entonces

$$\mathcal{H}_d^{sec}/\hbar = \sum_{k<l} b_{kl} I_{kz} I_{lz} - \frac{1}{2} (I_{kx} I_{lx} + I_{ky} I_{ly}). \quad (2.39)$$

Capítulo 3

Dinámica de sistemas de espines

“Why, Lisa, why, WHY?!”

— Tommy Wiseau

Tradicionalmente la interacción entre los espines se veía como un efecto de relajación con un tiempo de decaimiento T_2 en un experimento de resonancia magnética nuclear (sección 2.4). Sin embargo, los trabajos de refocalización de Hahn [35] y Rhim, Pines, y Waugh [36] permitieron dar un paso más allá y ver estos procesos como una dinámica cuántica, la cual puede ser revertida bajo algunas condiciones como se ha discutido en la sección 2.5, donde el concepto se generaliza a eco de Loschmidt [32].

Analizando el tiempo de decaimiento de la señal ó de los ecos en si, uno puede extraer información acerca de las interacciones con el entorno, la dinámica involucrada y la irreversibilidad del sistema [28, 37]. Por otro lado, diseñando adecuadamente a las secuencias de pulsos, se puede crear un hamiltoniano efectivo del sistema [31], lo cual permite estudiar dinámicas de espines de sistemas mesoscopicamente grandes [7, 38] del orden de los miles de espines. En esta sección se estudiará la dinámica de cadenas de espines 1/2 para hamiltonianos típicos de interacción, con el fin de entender sus propiedades básicas, como por ejemplo el efecto que tiene sobre la magnetización total, la forma de transmitir la magnetización de espín a espín, etc. Se buscó corroborar la evolución calculada numéricamente en sistemas que poseen solución analítica, y adquirir así las herramientas necesarias para el análisis de cadenas de espines bajo distintos hamiltonianos y condiciones que serán necesarias en los capítulos siguientes.

3.1. Hamiltoniano XY

El hamiltoniano XY viene dado por los términos del hamiltoniano dipolar que involucran operadores de proyección de espín en x e y , es decir,

$$\mathcal{H}_{XY} = \sum_{\substack{k,l \\ k < l}} b_{k,l} (I_{k,x} I_{l,x} + I_{k,y} I_{l,y}) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k,l \\ k < l}} b_{k,l} (I_k^+ I_l^- + I_k^- I_l^+), \quad (3.1)$$

donde los operadores $I_k^\pm = (I_{k,x} \pm i I_{k,y})$ son los operadores de subida y bajada de espín.

Este hamiltoniano conserva la magnetización total (en z) ya que $[I_z, \mathcal{H}_{XY}] = 0$, donde $I_z = \sum_k I_{kz}$.

Considerando, como primera aproximación, que las interacciones son solo a primeros vecinos el hamiltoniano queda de la forma

$$\mathcal{H}_{XY}^{\text{nn}} = \sum_{k < N} b_{k,k+1} (I_{k,x} I_{k+1,x} + I_{k,y} I_{k+1,y}) = \sum_{k < N} b_{k,k+1} (I_k^+ I_{k+1}^- + I_k^- I_{k+1}^+), \quad (3.2)$$

y si además los espines son idénticos y equidistantes, tenemos $b_{k,k+1} = b$.

3.1.1. Transformación de Wigner-Jordan

Una cadena de espines con interacciones a primeros vecinos dadas por la Ec. (3.2) es analíticamente resoluble para cadenas de 2 y 3 espines. Sin embargo, la resolución analítica de este problema se vuelve rápidamente engorrosa debido al crecimiento exponencial del espacio de Hilbert del sistema con el número de espines (2^N). La transformación de Wigner-Jordan [39] nos permite mapear el sistema de espines interactuantes a través de Ec. (3.2) a un sistema de fermiones no interactuantes, con lo cual la dimensión del espacio de Hilbert involucrado es N .

Cualitativamente, pasamos de ver un sistema de espines interactuantes, donde la magnetización se propaga en un sistemas de “sitios” (los espines), a ver un sistema donde fermiones se mueven de sitio en sitio libremente y solamente limitados por que no haya más de uno de ellos por sitio. En esta representación, la probabilidad de encontrar ocupado un cierto sitio esta relacionada con la magnetización media en el espín correspondiente a ese sitio en la representación anterior.

La transformación de Wigner-Jordan viene dada por las siguientes ecuaciones

$$I_{k,z} = c_k^\dagger c_k - 1/2, \quad (3.3)$$

$$I_k^+ = c_k^\dagger e^{i\pi \sum_{l < k} n_l}, \quad (3.4)$$

$$I_k^- = c_k e^{-i\pi \sum_{l < k} n_l}, \quad (3.5)$$

donde c_k^\dagger y c_k son los operadores de creación y destrucción de fermiones en el sitio k , y n_k el operador de número en el sitio k . Realizando esta transformación sobre el

hamiltoniano (Ec. (3.2)) se obtiene

$$\mathcal{H}_{XYnn} = \frac{1}{2} \sum_k b_{k,k+1} (c_{k+1}^\dagger c_k + c_k^\dagger c_{k+1}). \quad (3.6)$$

El cual es el hamiltoniano de *tight-binding* para describir *hops* de electrones.

3.2. Cadenas de espines

3.2.1. Sistema de dos espines

Supongamos el caso de una cadena formada por dos espines de distinta especie (I , S , respectivamente) interactuando dipolarmente. Los mismos están en presencia de un campo magnético H_0 constante en la dirección z y dos campos de radio frecuencia $H_{1,I}$ y $H_{1,S}$. Este es un caso típico en experimentos de RMN utilizando la técnica de polarización cruzada por ejemplo entre $^{13}\text{C} - ^1\text{H}$ [34, 40]. El hamiltoniano de este sistema en la doble terna rotante viene dado por la siguiente ecuación

$$\frac{\mathcal{H}}{\hbar} = \Delta\omega_I I_z - \gamma_I H_{1,I} I_x + \Delta\omega_S S_z - \gamma_S H_{1,S} S_x + \mathcal{H}_d, \quad (3.7)$$

donde $\Delta\omega = \omega_{0,i} - \omega_i$ ($i = I, S$) siendo $\omega_{0,i}$ la frecuencia de Larmor de cada espín, ω_i la frecuencia de los campos de radiofrecuencia aplicados, \mathcal{H}_d es el hamiltoniano dipolar (Ec. (2.38)) y I_α , S_α con $\alpha = x, y, z$ los operadores proyección de espín de cada espín. Suponiendo que $\Delta\omega_I = \Delta\omega_S = 0$ y $|\gamma_I H_{1,I} + \gamma_S H_{1,S}| \gg |b|$, es decir, que los campos de radio frecuencia son aplicados en resonancia y con energías mucho mayores a las involucradas en la interacción dipolar podemos despreciar los términos no seculares del hamiltoniano dipolar (aquellos que no conmutan con $(I_x + S_x)$) y reescribir el hamiltoniano del sistema de la siguiente forma

$$\frac{\mathcal{H}}{\hbar} = \frac{1}{2} [s(I_x + S_x) + d(I_x - S_x) + b(I_z S_z + I_y S_y)], \quad (3.8)$$

donde $s = -(\gamma_I H_{1,I} + \gamma_S H_{1,S})$ y $d = -(\gamma_I H_{1,I} - \gamma_S H_{1,S})$.

Supongamos ahora que la condición inicial de nuestro sistema es con uno de los dos espines polarizados, I_z por ejemplo, y el otro (S_z) no polarizado. En este caso, suponemos entonces que el espín I está en equilibrio con el campo estático H_0 y su operador densidad viene dado por la Ec. (2.33). Inmediatamente después de aplicar un pulso de $\pi/2$, la condición inicial viene dada por el operador densidad $\rho(0) = e^{\beta\hbar\omega_{0,I}I_x} / \text{Tr}[e^{\beta\hbar\omega_{0,I}I_x}]$ siendo $\beta = 1/k_b T$. En la aproximación de temperaturas altas, i.e. $\hbar\omega_{0,I} / (k_b T) \ll 1$, la condición inicial queda

$$\rho(0) = \frac{\mathbb{1} + \beta\hbar\omega_{0,I}I_x}{\mathbb{1}}. \quad (3.9)$$

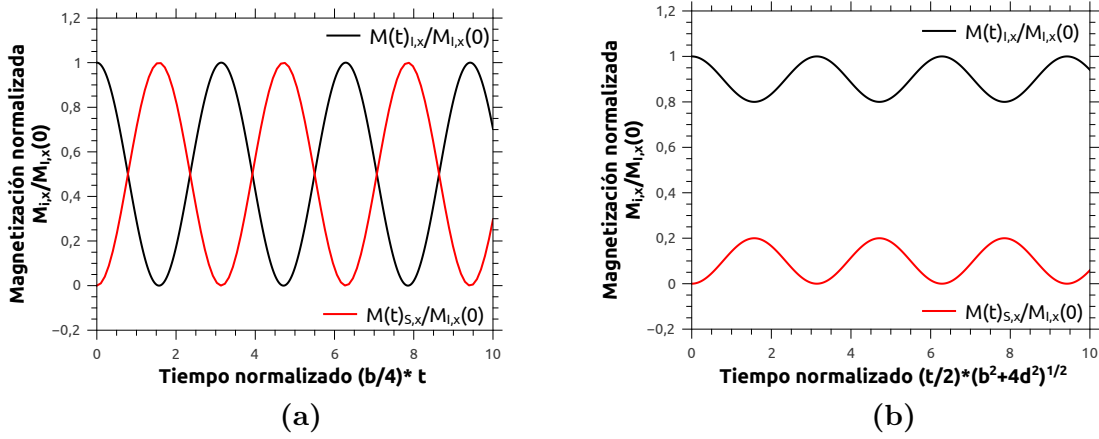


Figura 3.1: (a) Magnetización normalizada ($M_{i,x}/M_{i,x}(0)$) en función del tiempo t de dos espines interactuantes en resonancia con un Hamiltoniano XY. El tiempo esta normalizado por la frecuencia de oscilación $b/4$. La magnetización se transfiere completamente de un espín al otro periódicamente. (b) Magnetización normalizada ($M_{i,x}/M_{i,x}(0)$) en función del tiempo t de ambos espines fuera de resonancia. El tiempo está normalizado por la frecuencia de oscilación $\sqrt{b^2 + 4d^2}/2$. La transferencia de la magnetización, si bien sigue siendo periódica con una frecuencia diferente al caso en resonancia, no es total.

Esta aproximación es válida debido a que la energía térmica $k_b T$ a temperatura ambiente es 5 ordenes de magnitud más grande que la energía Zeeman $\hbar\omega_{0,I}$, la cual es a su vez 5 ordenes de magnitud mayor a las energías de interacción dipolares. Tenemos entonces que $\beta\hbar\omega_{0,I}$ es del orden de 10^{-5} .

Usando la ecuación de Liouville-von Neumann (2.34) y calculando el valor medio de los operadores de espín, se obtiene la magnetización de cada uno de los espines en función del tiempo. A continuación se muestra este resultado en dos situaciones diferentes.

Espines en resonancia

Experimentalmente se puede conseguir una situación de resonancia entre ambos espines, en este caso se tiene que $d = 0$ en la Ec. (3.8), lo que se conoce como condición de Hartmann-Hahn [41]. Calculando el operador densidad evolucionado (sección 2.6.1), tenemos $\rho(t) = e^{-i\mathcal{H}t/\hbar}\rho(0)e^{i\mathcal{H}t/\hbar}$. Calculando los valores medios de I_x e S_x a través de la Ec. (2.36), obtenemos la magnetización de los espines

$$M_{I_x}(t) = \frac{\beta\hbar\omega_{0,I}}{4} \cos^2(bt/4), \quad (3.10)$$

$$M_{S_x}(t) = \frac{\beta\hbar\omega_{0,I}}{4} \sin^2(bt/4), \quad (3.11)$$

donde se observa que la magnetización total $M_{I_x}(t) + M_{S_x}(t)$ se conserva. La magnetización de cada espín en cambio oscila de uno a otro como se muestra en la figura 3.1-a, logrando una transferencia total de la magnetización de un espín hacia el otro.

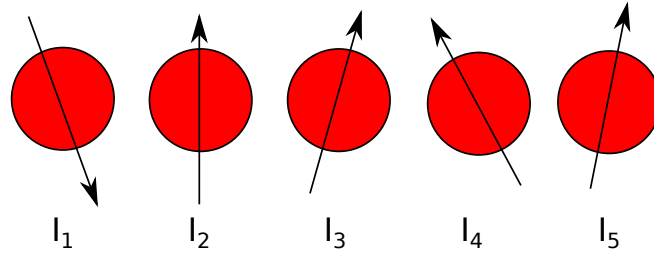


Figura 3.2: Esquema representativo de una cadena de $N = 5$ espines $1/2$ equidistanciados interaccionando entre ellos, donde a cada uno se le anexó un número identificatorio.

Espines fuera de resonancia

Cuando nos encontramos fuera de la condición de resonancia ($d \neq 0$), la transferencia de la magnetización de los espines no es absoluta. En este sistema de dos espines, la magnetización máxima alcanzada por el espín S (inicialmente no polarizado) es $\frac{b^2}{b^2+4d^2}M_0$, donde M_0 es la magnetización inicial del espín I (inicialmente polarizado). Esto se observa al calcular las magnetizaciones de ambos espines en función del tiempo, análogamente a como se realizó en la sección anterior,

$$M_{I_x}(t) = \frac{\beta\hbar\omega_{0,I}}{8} \left(1 + \left(\frac{4d^2}{b^2+4d^2} + \left(\frac{b^2}{b^2+4d^2} \right) \cos(\sqrt{b^2+4d^2}t/2) \right) \right), \quad (3.12)$$

$$M_{S_x}(t) = \frac{\beta\hbar\omega_{0,I}}{8} \left(\frac{b^2}{b^2+4d^2} \right) \left(1 - \cos(\sqrt{b^2+4d^2}t/2) \right). \quad (3.13)$$

En la figura 3.1-b se muestra un caso ilustrativo donde $d = b = 1$. Se observa que la magnetizaciones de los espines mantienen su periodicidad cambiando su frecuencia respecto a la condición de resonancia. La transferencia de la magnetización no es total, si no que solo un quinto de la misma logra transferirse al espín inicialmente no magnetizado a diferencia del caso en resonancia (figura 3.1-b) donde la transferencia es total.

3.2.2. Sistema de 5 espines $1/2$

Primeros vecinos

Se estudió una cadena formada por $N = 5$ espines $1/2$ idénticos (Ver Figura 3.2), interaccionando mediante el hamiltoniano XY a primeros vecinos (Ec. (3.2)) con $b_{k,k+1} = b$. Utilizando una condición inicial, donde el primer espín I_1 se encuentra polarizado y los demás (I_2, I_3, I_4, I_5) no polarizados, se resolvió analíticamente la dinámica de este sistema utilizando la transformación de Wigner-Jordan (Subsección (3.1.1)). Se abordó este problema numéricamente con el fin de poder contrastar las simulaciones con resultados analíticos mientras el sistema es resoluble analíticamente.

Para la resolución analítica se transformó el hamiltoniano dado por la ecuación (3.2) a través de la transformación de Wigner-Jordan (Ecs. (3.5)), obteniendo el hamiltoniano dado por la Ec. (3.6). Éste se escribió en una base dada por vectores de onda correspondientes a un fermión en un sitio y el resto vacíos. En esta base el hamiltoniano (Ec. (3.6)) tiene elementos diferentes de cero sólo en las diagonales inmediatamente superior e inferior a la diagonal principal.

Para el cálculo de la magnetización del espín I_i en función del tiempo, se utilizó la ecuación (2.36) escribiendo los operadores involucrados en forma matricial utilizando la base de fermiones. En estas condiciones la magnetización M_i esta dada por

$$M_i(t) = Tr \left[(c_i^\dagger c_i)_{[WJ]} \rho_{[WJ]}(t) \right], \quad (3.14)$$

donde $\rho_{[WJ]}(t)$ es la matriz densidad del sistema a tiempo t . $I_{i,z} = (c_i^\dagger c_i)_{[WJ]}$, donde el subíndice $[WJ]$ indica que las matrices están en la base de fermiones. En esta base el observable nos da el elemento de matriz $M_i(t) = (\rho_{[WJ]})_{i,i}(t)$. La matriz densidad evolucionada se obtuvo de la expresión $\rho_{[WJ]}(t) = [e^{-\mathcal{H}_{XY}^{nn}t/\hbar} \rho(0) e^{\mathcal{H}_{XY}^{nn}t/\hbar}]_{[WJ]}$ mediante álgebra de matrices.

La simulación numérica se realizó sin utilizar la transformación de Wigner-Jordan. Los operadores de espín involucrados se escribieron como productos de Kronecker de las matrices de Pauli y matrices identidad de dimensión dos. La matriz densidad del sistema se calculó iterativamente multiplicando la matriz obtenida en un tiempo anterior por los operadores de evolución $U(t) = e^{-\mathcal{H}_{XY}^{nn}t/\hbar}$ y $U^\dagger(t)$, es decir, $\rho(t + \delta t) = U^\dagger(\delta t) \rho(t) U(\delta t)$. El paso de tiempo utilizado fue $0,1 * (2b)$ siendo b la energía de interacción del hamiltoniano (Ec. (3.2)). Luego la magnetización en cada espín se calculó mediante $M_i(t) = Tr [I_i \rho(t)]$. Las mismas se muestran en la figura 3.3-a en función del tiempo, siendo los resultados de la simulación los puntos y la solución analítica la curva sobre los mismos.

Se observa que la magnetización se propaga a través de los espines, y que la magnetización se transfiere casi totalmente al espín 5 para luego volver, en menor medida al espín 1 (eco mesoscópico).

Como se ve en esta propagación de la magnetización, la simetría y el tamaño del sistema influye fuertemente en las dinámicas, esto se ve claramente en la figura 3.3-b, donde la condición inicial utilizada implica al espín 1 y 5 polarizados, mientras que los otros no polarizados. En este caso, la dinámica de la magnetización para los pares de espines (1,5) y (2,4) es la misma.

Interacciones de largo alcance

Se calculó numéricamente la dinámica de $N = 5$ espines $1/2$ mediante un hamiltoniano XY con interacciones a largo alcance (Ec. (3.1)), siendo los coeficientes de

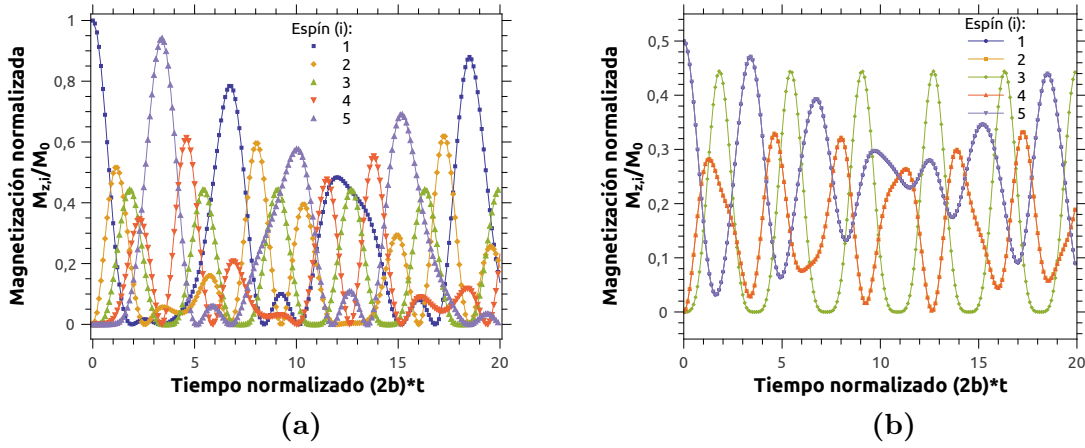


Figura 3.3: Magnetización normalizada en función del tiempo para cada espín ($M_{z,i}/M_{z,i}(0)$) de una cadena de $N = 5$ espines $1/2$ interactuando mediante un hamiltoniano XY a primeros vecinos (Ec. 3.2). El tiempo t está normalizado por la magnitud de las interacciones b . (a) Condición inicial localizada, es decir uno de los espines se encuentra magnetizado mientras que los otros no. (b) Condición inicial bilocalizada, es decir, solo los espines I_1 e I_5 se encuentran magnetizados inicialmente.

interacción $b_{ij} = \frac{b}{|i-j|^3}$. Es decir con una dependencia $1/r_{ij}^3$ como en la interacción dipolar descrita en la Sec. 2.6.1, donde la separación entre espines se consideró de una unidad.

La dinámica de la magnetización de los espines cuando la condición inicial es el primer espín magnetizado se observa en la figura 3.4-a. A tiempos cortos la dinámica presenta un comportamiento análogo a la dinámica del hamiltoniano interactuante a primeros vecinos transfiriendo la magnetización del espín 1 al 5. Sin embargo, a tiempos mayores la dinámica se vuelve diferente, y la magnetización se “esparce” mucho más en el sistema de espines, donde en este caso retorna mucho menos magnetización al espín 1 (eco mesoscópico).

La figura 3.4-b muestra la dinámica de las magnetizaciones de los espines, cuando los espines 1 y 5 se encuentran magnetizados inicialmente. La dinámica continua conservando la simetría entre espines (1,5) y (2,4) ya que las interacciones a largo alcance colocadas no rompen la simetría. Al igual que con la primer condición inicial, el sistema “esparce” la magnetización más eficientemente. Esto queda claro al observar la dinámica del espín 3, donde a primeros vecinos la magnetización normalizada del mismo oscila periódicamente entre 0 y 0.44 mientras que con interacciones a largo alcance, esta periodicidad se rompe y los valores de magnetización alcanzados son menores.

3.3. Conclusiones

En éste capítulo se estudió como evoluciona la magnetización de espines interactuando a través de un hamiltoniano XY, el cual está presente en la interacción dipolar de sistemas en estado sólido. Se observó que el mismo transfiere magnetización entre espi-

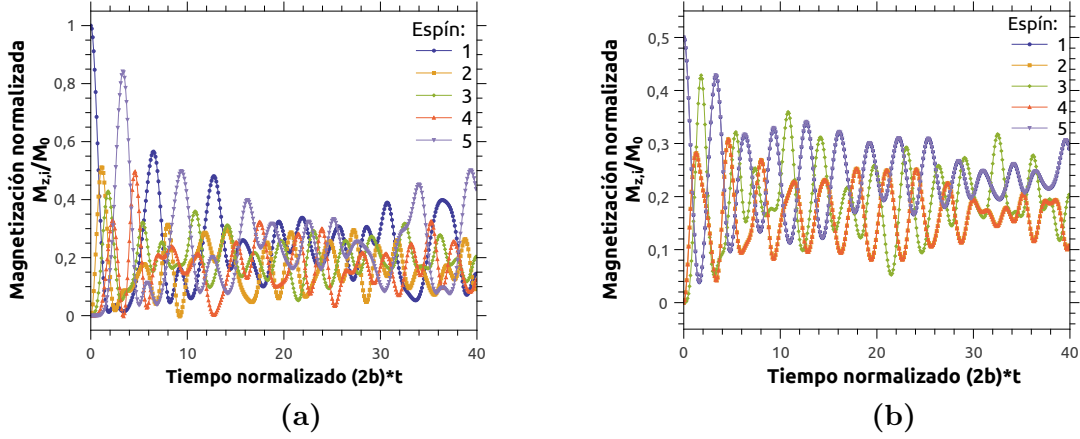


Figura 3.4: Magnetización normalizada en función del tiempo para cada espín ($M_{z,i}/M_{z,i}(0)$) en una cadena de $N = 5$ espines $1/2$ interactuando mediante un hamiltoniano XY con interacciones de largo alcance $\propto 1/r_{ij}^3$ (Ec. (3.1)). El tiempo t está normalizado por b , la magnitud mayor de las interacciones. (a) Condición inicial localizada, es decir uno de los espines se encuentra magnetizado mientras que los otros no. (b) Condición inicial bilocalizada, es decir, sólo los espines I_1 e I_5 se encuentran magnetizados inicialmente.

nes, y, que para esta transferencia sea completa, los espines deben estar en resonancia, condición que se da naturalmente en sistemas de espines idénticos.

Se reprodujeron análisis teóricos que muestran que la cadena de espines (con $N = 5$ en este capítulo) interactuando a través de $\mathcal{H}_{XY_{nn}}$ es mapeable a un sistema de fermiones no interactuantes, donde la transmisión de la magnetización se observa como un movimiento de los fermiones en la cadena. Se observó que, debido al tamaño finito de la cadena, se observan ecos mesoscópicos en la magnetización.

Se simuló la dinámica de una cadena de $N = 5$ espines interactuando mediante \mathcal{H}_{XY} , donde se observó un comportamiento similar al observado para interacciones a primeros vecinos. En este caso, la magnetización se propaga de un sitio al otro, sin embargo, con interacciones a largo alcance la magnetización se “esparce” más eficientemente, reduciendo el tamaño de las recurrencias y ecos mesoscópicos. Estos resultados sirvieron para setear los algoritmos numéricos, observar los efectos de tamaño finito, los efectos de las interacciones de largo alcance, para considerarlos en los siguientes capítulos.

Capítulo 4

Coherencias cuánticas multiples

“Whisky para los vencidos!”

— El cuarteto de Nos

4.1. Definición, aplicaciones y propiedades

Como se dijo en el la subsección 2.6.1 los elementos no diagonales de la matriz densidad ρ_{rs} indican una superposición coherente de los autoestados $|r\rangle$ y $|s\rangle$. En resonancia magnética nuclear, éstas coherencias cuánticas surgen de correlaciones entre espines individuales a través de sus interacciones. Consideremos entonces un sistema de K espines $1/2$ en un experimento de resonancia magnética nuclear. La interacción dominante será la interacción Zeeman (Ec. (2.1)) con el campo magnético constante $\mathbf{H}_0 = H_0\mathbf{k}$. Esta interacción causa una separación de los niveles de energía (Ver capítulo 2) de acuerdo a la dirección del campo y a la diferencia en las proyecciones de espín total $\Delta M_{rs} = M_r - M_s$, donde $\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm K$. Bajo estas condiciones el elemento de matriz ρ_{rs} en la base Zeeman, representa una coherencia cuántica de orden $\Delta M_{rs} = M_r - M_s$, siendo M los autovalores del operador de espín total I_z .

Veamos algunos ejemplos para introducir este concepto a nuestro problema. Primero supongamos que el sistema de espines $1/2$ inicialmente esta en equilibrio con el campo externo $\mathbf{H}_0 = H_0\mathbf{k}$. El estado del sistema será descrito mediante la distribución de Boltzmann, y la matriz densidad será diagonal en la base del hamiltoniano. Bajo estas condiciones no existirán coherencias. Al aplicar un pulso $\pi/2$ perpendicular a \mathbf{H}_0 , los estados de cada espín resultantes pasan a ser superposiciones coherentes de $|1/2\rangle$ y $|-1/2\rangle$. Hay por ende un cambio en las magnetizaciones individuales, y en este caso las coherencias de orden de $\Delta m = \pm 1$ han sido excitadas. Estas coherencias de orden 1 están asociadas a las magnetizaciones transversales al campo, y pueden ser directamente observadas experimentalmente.

Ahora supongamos que el sistema de K espines $1/2$ se encuentra en el estado fundamental, es decir, debido a que la interacción Zeeman es dominante, en el estado $|M = -K/2\rangle$. Si, en esta condición inicial los espines pasan colectivamente de tener proyección de espín $-1/2$ a $1/2$ en z , el estado final será $|M = K/2\rangle$ y el cambio $\Delta M = K$. En este caso la coherencia cuántica de orden K necesita ser excitada para permitir esta transición. Notar que la misma transición podría generarse rotando los espines individualmente con un pulso de radiofrecuencia, pero en este caso la coherencia de orden K no es excitada. El caso colectivo, a diferencia del caso anterior, cuando la coherencia excitada no es ± 1 no se puede observar experimentalmente de manera directa. Es por ello que deben implementarse diferentes técnicas para su observación [42].

Por último supongamos que el sistema de espines interacciona mediante un hamiltoniano \mathcal{H} . Si este hamiltoniano induce transiciones $\Delta m'$, las coherencias de ese orden serán excitadas. Por ejemplo, si un sistema interacciona mediante el hamiltoniano XY (Ec. (3.1)), solo habrá coherencias de orden cero ya que el mismo induce transiciones que conservan el momento magnético M , i.e. $\Delta M = 0$.

La importancia de este concepto en resonancia magnética nuclear viene dada por su diversidad de aplicaciones, como por ejemplo, la aplicación de coherencias cuánticas múltiples a la adquisición de imágenes y medición de constantes de difusión en sólidos, transferencia de polarización y edición de espectros, esquemas alternativos de excitación, aplicación de filtros en resonancia magnética de alta resolución y por ejemplo de particular interés en este trabajo caracterización de *clusters* de espines correlacionados [42].

4.1.1. Enumeración y evolución de las coherencias cuánticas múltiples

Enumeración

Consideremos el caso de K espines $1/2$ acoplados, los 2^K estados se encuentran en $(K + 1)$ niveles de energías dados por la separación Zeeman (los cuales en realidad pueden romper levemente su degeneración mediante las interacciones entre espines). Cada uno de estos niveles contiene

$$\binom{K}{p} = \frac{K!}{(K/2 + M_r)!(K/2 - M_r)!} \quad (4.1)$$

estados distintos, donde $p = (K/2 + M_r)$ denota el exceso de espines con proyección $m = 1/2$ necesarios para producir una magnetización M_r . La figura 4.1 representa esquemáticamente esta degeneración.

El número de pares de estados por los cuales una coherencia de orden ΔM puede

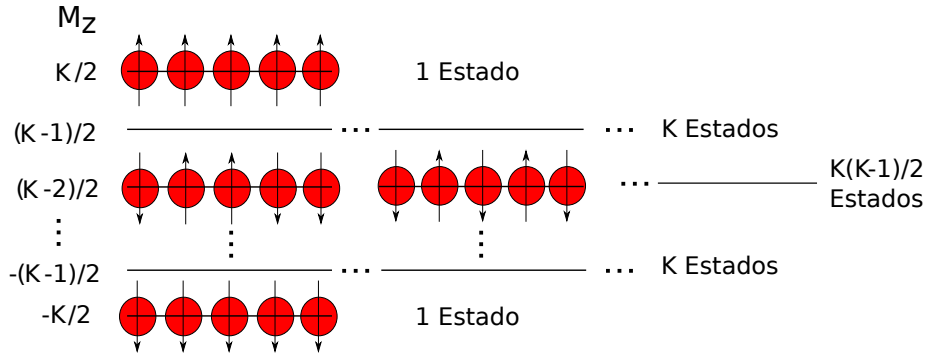


Figura 4.1: Esquema representativo de un sistema de K espines en la base Zeeman, donde a la izquierda se muestra la magnetización total del mismo M_z , y a la derecha el número de estados con magnetización M_z representados en líneas negras solidas. Sobre estas líneas se dibujaron algunos casos representativos de las combinaciones de espines. Los puntos negros representan estados y niveles intermedios no dibujados.

ser creada a partir de una superposición viene dado por

$$\sum_{p=0}^{K-\Delta M} \binom{K}{p} \binom{K}{\Delta M}, \quad \Delta M \neq 0 \quad (4.2)$$

y

$$\frac{1}{2} \sum_{p=1}^{K-1} \binom{K}{p} \left[\binom{K}{p} - 1 \right], \quad \Delta M = 0. \quad (4.3)$$

Utilizando la aproximación de Stirling se obtiene finalmente [42], para K suficientemente grandes y ΔM chicos respecto a K ,

$$J(\Delta M, K) = \frac{4^K}{\sqrt{K\pi}} e^{-\frac{(\Delta M)^2}{K}}. \quad (4.4)$$

Esta ultima ecuación permite calcular el tamaño del *cluster* de espines correlacionados suponiendo que las coherencias se excitan uniformemente entre todos los estados compatibles con K . Bajo esta suposición es posible ajustar la distribución de coherencias cuánticas múltiples mediante una gaussiana (Ec. (4.4)) y obtener K de su ancho, o del segundo momento de la distribución:

$$K = 2 \left(\sum_{\Delta M} (\Delta M)^2 * J(\Delta M) \right) / \left(\sum_{\Delta M} J(\Delta M) \right) \quad (4.5)$$

Evolución

Veamos la respuesta de una coherencia cuántica múltiple (CCM) de orden ΔM a un *offset* uniforme en el campo de resonancia. El sistema evolucionará entonces mediante la ecuación de Lioville-Neumann (2.34) $\frac{d\rho_{\Delta M}}{dt} = i[\rho_{\Delta M}, \mathcal{H}_{off}]$, siendo $\mathcal{H}_{off} = -\Delta\omega I_z$ y $\rho_{\Delta M} = |M_r\rangle \langle M_s|$ donde $|M_s\rangle$ representan estados de número magnético total M_i de

tal manera que $M_r - M_s = \Delta M$. Evaluando al conmutador tenemos,

$$\frac{d\rho_{\Delta M}}{dt} = (i\Delta M\Delta\omega)\rho_{\Delta M}, \quad (4.6)$$

y resolviendo la ecuación,

$$\rho_{\Delta M}(t) = \rho_{\Delta M}(0)e^{(i\Delta M\Delta\omega)t}. \quad (4.7)$$

Esto demuestra que la probabilidad de excitación de las coherencias no cambia y solo varia su fase que oscilará armónicamente a una frecuencia $(\Delta M\Delta\omega)$ [42]. Como esperábamos no se pueden excitar coherencias con un campo constante en z , y estas se van creando a medida que los espines se acoplan formando superposiciones cuánticas.

4.1.2. Medición de coherencias cuánticas múltiples

Las coherencias cuánticas múltiples no pueden ser observadas directamente con RMN, ya que el observable es la magnetización transversal, y como se ha dicho al comienzo de este capítulo, está relacionada con las coherencias de orden ± 1 . Por esto, para estudiar la dinámica de un sistema de espines en el cual existen evoluciones de coherencias cuánticas múltiples, debe hacerse a través de la detección de una coherencia de orden uno, es decir, midiendo la magnetización transversal [42].

El esquema general para un experimento de coherencias cuánticas múltiples se muestra en la Fig. 4.2-a. Durante el periodo de preparación (de duración τ) se establece una distribución de no-equilibrio de coherencias cuánticas múltiples a través de un hamiltoniano que acopla los espines. El sistema evoluciona a través del hamiltoniano a estudiar \mathcal{H}_1 un tiempo t_1 y la secuencia prosigue a través del periodo de mezcla, donde se convierten coherencias cuánticas múltiples en simples para ser observadas en el periodo de detección.

Para la detección de las mismas, sin necesidad de una evolución a través de \mathcal{H}_1 , se siguió el algoritmo desarrollado por Baum, *et al* [38], donde los elementos de la matriz densidad con coherencias de orden ΔM_z son observados rotando el estado alrededor del eje z (Ver Fig. 4.2-b) como se detalla a continuación.

Sea el operador de rotación $\hat{\phi}_z = e^{-i\phi\hat{I}_z}$, el operador densidad rotado un ángulo ϕ viene dado por

$$\rho(\phi) = \hat{\phi}_z \rho \hat{\phi}_z^\dagger = \sum_{\Delta M_z} \rho_{\Delta M_z} e^{i\Delta M_z \phi}, \quad (4.8)$$

donde el operador $\rho_{\Delta M_z}$ contiene todas las coherencias de orden ΔM_z , donde en particular $\rho_{\Delta M=0}$ incluye también las poblaciones.

Para determinar las coherencias en función del tiempo, se evoluciona el estado ρ un tiempo τ a través de \mathcal{H} , luego éste estado es rotado un ángulo ϕ y evolucionado

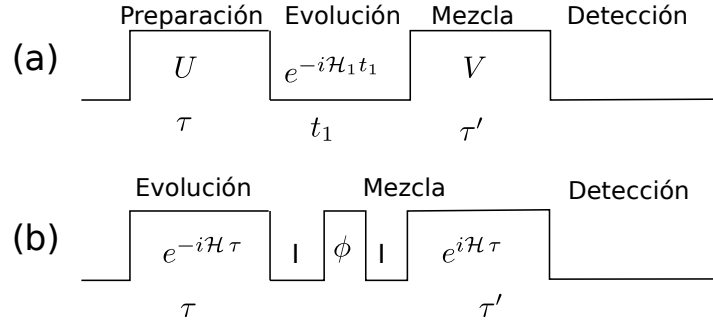


Figura 4.2: (a) Esquema general para un experimento de coherencia cuántica múltiples (CCM). Las mismas se establecen durante el periodo de preparación caracterizado por algún operador de evolución U , se evolucionan a través de un hamiltoniano \mathcal{H}_1 , y durante el periodo de mezcla se convierten las coherencias cuánticas múltiples (mediante el operador de evolución V) para ser observadas en el periodo de detección. (b) Esquema particular para observar la evolución de CCM. Se generan las mismas mediante el hamiltoniano \mathcal{H} durante un tiempo τ . La mezcla consiste en rotar el sistema y evolucionarlo mediante $-\mathcal{H}$ un tiempo τ para luego realizar la medición.

mediante $-\mathcal{H}$ un tiempo τ , obteniendo el estado final

$$\rho_f(2\tau) = e^{i\hat{H}\tau/\hbar} \rho_\phi(\tau) e^{-i\hat{H}\tau/\hbar} = \sum_{\Delta M} [e^{i\hat{H}\tau/\hbar} \rho_{\Delta M}(\tau) e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}] e^{i\Delta M \phi}. \quad (4.9)$$

Midiendo la componente \hat{I}_z tenemos

$$\langle \hat{I}_z \rangle (\phi, \tau) = \text{Tr}[\hat{I}_z \rho_f(2\tau)], \quad (4.10)$$

$$= \text{Tr}[\rho(\tau) \rho_\phi(\tau)], \quad (4.11)$$

$$= \sum_{\Delta M} e^{i\Delta M \phi} \text{Tr}[\rho_{\Delta M}^2(\tau)], \quad (4.12)$$

$$= \sum_{\Delta M} e^{i\Delta M \phi} J_{\Delta M}(\tau), \quad (4.13)$$

donde $J_{\Delta M}(\tau)$ son las amplitudes de las coherencias cuánticas múltiples. Esta última expresión indica que las CCM pueden obtenerse con una transformada de Fourier en ϕ del observable $\langle \hat{I}_z \rangle (\phi, \tau)$. Entre 4.10 y 4.10 se usó que la condición inicial es proporcional al observable \hat{I}_z , si la condición inicial es, por ejemplo, $\hat{I}_{z,1}$ el observable a medir pasa a ser $\hat{I}_{z,1}$, obteniendo las CCM transformando Fourier en ϕ $\langle \hat{I}_{z,1} \rangle (\phi, \tau)$.

4.2. Hamiltoniano Double Quantum

El hamiltoniano \mathcal{H}_0 o *double quantum hamiltonian* ha sido utilizado en numerosos trabajos [6, 11] para generar correlaciones entre los espines del sistema (*clusters* de

espines correlacionados). El mismo viene dado por:

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{i < j} d_{i,j} [I_{i,x} I_{j,x} - I_{i,y} I_{j,y}] = - \frac{1}{2} \sum_{i < j} d_{ij} [I_i^+ I_j^+ + I_i^- I_j^-], \quad (4.14)$$

siendo $d_{i,j} = \frac{\gamma^2 \hbar^2}{2r_{i,j}^3} (1 - 3 \cos^2(\theta_{i,j}))$ la constante de acople, donde γ es el factor giromagnético y $\theta_{i,j}$ el ángulo entre el vector internuclear $\mathbf{r}_{i,j}$ y el campo magnético constante \mathbf{H}_0 . Se observa, que a diferencia del hamiltoniano XY, éste no conserva la magnetización si no que invierte simultáneamente dos espines de la misma orientación, produciendo cambios de $\Delta M = \pm 2$ en la magnetización.

Si se consideran interacciones solamente a primeros vecinos, equidistancia entre los espines y que la cadena (de N espines) se encuentra perpendicular al campo aplicado tenemos $d_{i,j} = d_{i,i+1} = d = \frac{\gamma^2 \hbar^2}{2r^3}$. Bajo estas condiciones el hamiltoniano \mathcal{H}_0 queda de la forma:

$$\mathcal{H}_0^{\text{nn}} = d \sum_{i=1}^{N-1} (I_i^+ I_{i+1}^+ + I_i^- I_{i+1}^-). \quad (4.15)$$

4.2.1. Resultados Analíticos previos de evoluciones de coherencias cuánticas múltiples

El cálculo de las coherencias cuánticas múltiples para cadenas de N espines $1/2$ bajo el hamiltoniano \mathcal{H}_0 a primeros vecinos, y condición inicial termalizada con \mathbf{H}_0 ($\rho_0 = \frac{1+\beta\omega_0 I_z}{\text{Tr}[\mathbb{I}]}$), se puede realizar analíticamente [43]. Se observó que en este caso, solo las coherencias de orden cero y dos pueden ser excitadas y vienen dadas por las expresiones

$$J_0(\tau) = \frac{1}{N} \sum_k \cos^2(4b\tau \cos(k)) \quad (4.16)$$

y

$$J_{\pm 2}(\tau) = \frac{1}{2N} \sum_k \sin^2(4b\tau \cos(k)) \quad (4.17)$$

respectivamente, donde $k = \frac{\pi n}{N+1}$ con $n = 1, 2, \dots, N$ y N el número de espines.

4.3. Evolución de un sistema de 5 espines $1/2$

4.3.1. Condición inicial

Se estudió la evolución de las coherencias cuánticas múltiples (CCM) en función del tiempo para dos condiciones iniciales (CI), un estado térmico (ó termalizado) dado

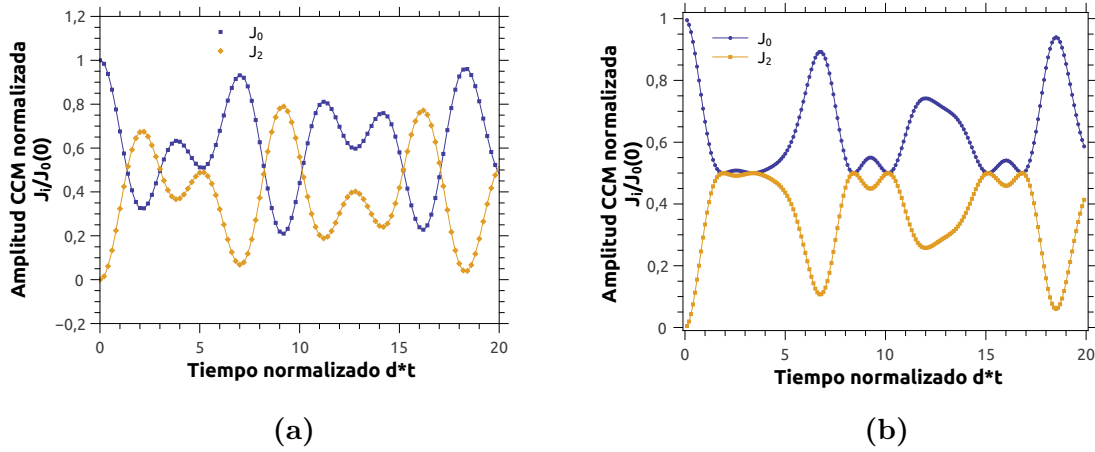


Figura 4.3: Coherencias cuánticas múltiples de orden cero y dos normalizadas ($J_i(t)/J_0(0)$ con $i = 1, 2$), en función del tiempo t renormalizado con la magnitud de interacción d . El sistema es una cadena de 5 espines 1/2 con interacciones a primeros vecinos descritas por \mathcal{H}_0^{nn} , Ec. (4.15), para dos condiciones iniciales. (a) Condición inicial termalizada (Ec. (4.18)). En este caso los puntos representan datos simulados mientras que la curva continua la función analítica (Ecs. (4.16)-(4.17)). (b) Condición inicial localizada (Ec. (4.19)). En este caso las líneas solamente unen datos simulados (puntos).

por

$$\rho_T(0) = e^{\beta\omega_{0,I}I_z} / \text{Tr}[e^{\beta\omega_{0,I}I_z}] \simeq \frac{\mathbb{1} + \beta\omega_{0,I}I_z}{\text{Tr}[\mathbb{1}]}, \quad (4.18)$$

y un estado donde solo un espín está excitado (localizado)

$$\rho_L(0) = e^{\beta\omega_{0,I}I_{1,z}} / \text{Tr}[e^{\beta\omega_{0,I}I_{1,z}}] \simeq \frac{\mathbb{1} + \beta\omega_{0,I}I_{1,z}}{\text{Tr}[\mathbb{1}]}. \quad (4.19)$$

4.3.2. Interacción a primeros vecinos

Para calcular numéricamente las coherencias cuánticas múltiples se siguió la secuencia de rotaciones y evoluciones realizadas experimentalmente para dicho fin [38] (Fig. 4.2-b), las cuales fueron descritas al comienzo del capítulo (subsección 4.1.2). Se realizó esta secuencia para 16 ángulos de rotación ϕ , ya que esta cantidad permite observar todas las coherencias involucradas sin pérdida de precisión. Consideramos primero evoluciones con el hamiltoniano con interacciones a primeros vecinos H_0^{nn} (Ec. (4.15)) y con condición inicial termalizada (Ec. (4.18)). En la figura 4.3-a se muestran las coherencias de orden 0 y orden 2 normalizadas ($J_i(t)/J_0(0)$ con $i = 1, 2$) en función del tiempo t renormalizado con la magnitud de interacción d . Los puntos representan cálculos numéricos, los cuales se realizaron análogamente a las simulaciones del capítulo 3, mientras que las líneas representan las curvas analíticas predichas por las Ecs. (4.16)-(4.17).

En la figura 4.3-b se muestran las coherencias cuánticas múltiples normalizadas ($J_i(t)/J_0(0)$) en función del tiempo t renormalizado con la magnitud de interacción d cuando la condición inicial es localizada (Ec. (4.19)). La interacción viene dada por el

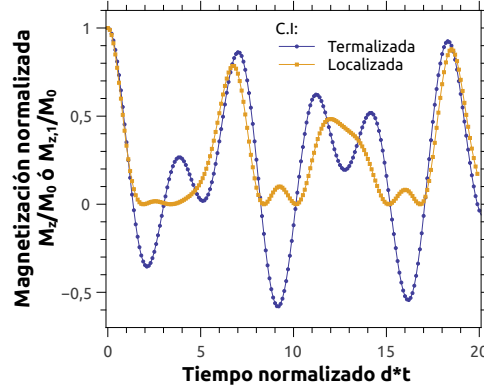


Figura 4.4: Dinámica de la magnetización total normalizada, $M_z(t)/M_0 = (\sum_1^5 M_{z,i}(t))/(\sum_1^5 M_{z,i}(0))$ (azul), y de la magnetización del primer espín $M_{z,1}(t)/M_{z,1}(0)$ (amarillo), en función del tiempo t renormalizado con la magnitud de interacción d . 5 espines 1/2 conforman el sistema en forma de cadena, con interacciones a primeros vecinos descritas por H_0^{nn} (Ec. (4.15)) para dos condiciones iniciales, termalizada y localizada (Ecs. (4.18)-(4.19) respectivamente). Se observa que la forma funcional de la dinámica de la magnetización total con condición inicial termalizada coincide con la dinámica de la coherencia múltiple de orden 0 ($J_0(t)$, Ec. (4.16)) para esta misma condición inicial. La forma funcional dinámica de la magnetización local $M_{z,1}(t)$ para la condición inicial localizada coincide con la forma funcional de la dinámica de la coherencia múltiple de orden cero ($J_0(t)$) para esta condición.

hamiltoniano H_0^{nn} (Ec. (4.15)), y en este caso la línea continua simplemente une datos simulados.

Se observa que la dinámica de la coherencia de orden cero coincide con la dinámica del observable medido (magnetización total para la CI termalizada y magnetización del primer espín para la condición inicial localizada) evolucionando a través de \mathcal{H}_0 (Fig. 4.4). En este caso, cadenas de espines con interacción a primeros vecinos, la dinámica provocada por el hamiltoniano \mathcal{H}_0 es mapeable a la dinámica del hamiltoniano XY pero invirtiendo la magnetización de los espines impares [43].

4.3.3. Interacción de largo alcance

Se calculó la evolución de las coherencias en sistemas de espines 1/2 con interacciones a largo alcance descritas por el hamiltoniano \mathcal{H}_0 (Ec. (4.14)). Los coeficientes de interacción se consideraron como $d_{i,j} = \frac{d}{|i-j|^3}$, es decir con una dependencia $1/r_{ij}^3$ acorde a la interacción dipolar, donde la separación entre espines vecinos se consideró como la unidad.

La figura 4.5-a y 4.5-b muestran las dinámicas de las coherencias cuánticas múltiples normalizadas para la condición inicial termalizada y con excitación localizada respectivamente (Ecs. (4.18) y (4.19)) en función del tiempo t renormalizado con la magnitud de interacción d . En ambos casos, se observa que las interacciones a largo alcance generan excitaciones de coherencias de orden mayor a 2. Sin embargo, éstas están limitadas por el tamaño del sistema, ya que para una cadena de espines N interaccionando me-

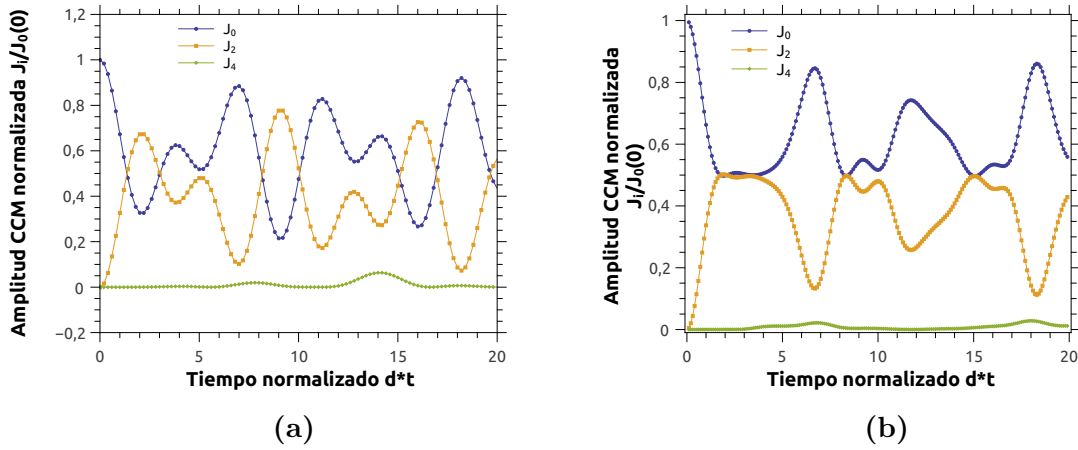


Figura 4.5: Amplitud de las coherencias cuánticas múltiples de orden cero y dos normalizadas ($J_0(t)/J_0(0)$ y $J_2(t)/J_0(0)$) en función del tiempo t renormalizado con la magnitud de interacción d . El sistema es una cadena de 5 espines 1/2 con interacciones de largo alcance descritas por \mathcal{H}_0 (Ec. (4.14)), para dos condiciones iniciales. (a) Condición inicial termalizada (Ec. (4.18)). (b) Condición inicial localizada (Ec. (4.19)). En ambos casos las líneas unen datos simulados (puntos).

diante \mathcal{H}_0 no se pueden excitar coherencias mayores a N si este es par ó $N - 1$ si el mismo es impar [11].

Nuevamente, calculando la dinámica de la magnetización se observa que esta posee el mismo comportamiento que la coherencia de orden cero.

4.4. Evolución de un sistema de 6 espines 1/2

Se realizó un estudio análogo al anterior para una cadena de 6 espines 1/2 con interacciones dadas por el hamiltoniano *double quantum* a primeros vecinos (\mathcal{H}_0^{nn} Ec. (4.15)) y a largo alcance (\mathcal{H}_0 Ec. (4.14)). Se obtuvieron resultados análogos a los anteriores. Se observa que el hamiltoniano excita coherencias de orden par, siendo solo hasta orden dos para interacciones a primeros vecinos y hasta de orden 6 para interacciones a largo alcance.

En la figura 4.6 se muestra la evolución de las coherencias cuánticas múltiples para una cadena de 6 espines 1/2 con interacciones a largo alcance (dadas por \mathcal{H}_0) para dos condiciones iniciales, condición inicial termalizada y condición inicial localizada (Fig. 4.6-a y 4.6-b respectivamente).

Se graficaron las amplitudes de las coherencias cuánticas múltiples obtenidas a tiempo $t/(2d) = 1,6$ y $t/(2d) = 14,5$ en forma de histograma (Ver Fig. 4.7 respectivamente) para la condición inicial termalizada. Motivados por la ecuación (4.4), se ajustó una gaussiana al histograma obtenido, de donde se obtuvo que el número de espines correlacionados a tiempo $t/(2d) = 1,6$ es 4,3 mientras que para $t/(2d) = 14,5$ es 7,7. Este resultado es claramente incorrecto debido a que el número de espines correlacionados obtenido es mayor al tamaño del sistema. Sin embargo, esto puede explicarse a partir

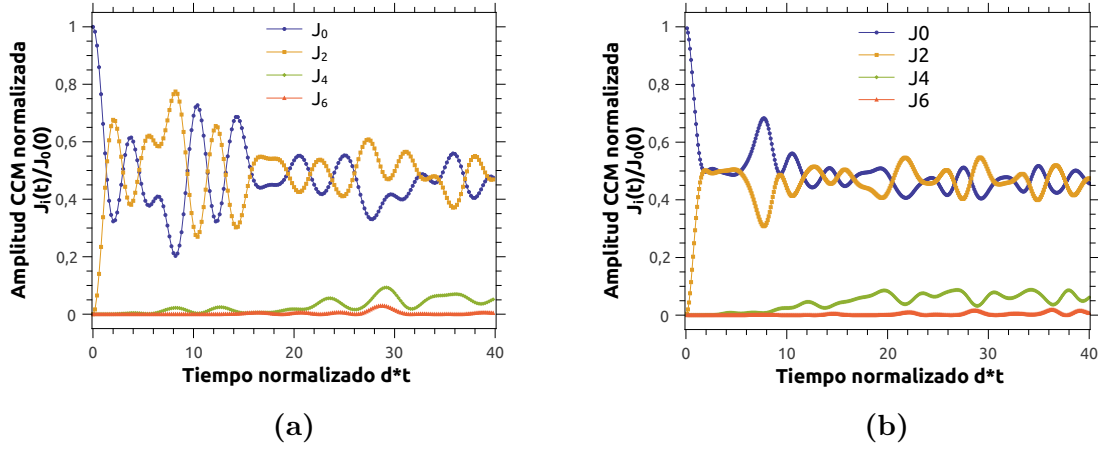


Figura 4.6: Amplitud de las coherencias cuánticas múltiples de orden cero, dos, cuatro y seis normalizadas ($J_i(t)/J_0(0)$) en función del tiempo t renormalizado con la magnitud de interacción d . El sistema es una cadena de espines $1/2$ con $N = 6$ y con interacciones de largo alcance descritas por \mathcal{H}_0 (Ec. (4.14)). Se consideran dos condiciones iniciales: (a) Condición inicial termalizada (Ec. (4.18)) y (b) Condición inicial localizada (Ec. (4.19)). En ambos casos las líneas unen los datos simulados (puntos).

de que la aproximación utilizada para llegar a (4.4), no es válida en este caso debido a la pequeña cantidad de espines involucrados y de fluctuaciones debidas al tamaño finito del sistema. Además, el modelo que deriva en la ec. (4.4), esta basado en la suposición de que todas las coherencias de la matriz densidad se excitan por igual a medida que se incrementa el numero de espines correlacionados. Este modelo solo funciona en sistemas muy grandes [38, 42].

4.5. Cluster size de un sistema de espines $1/2$

Se calculó el tamaño del cluster size, a partir del segundo momento de la distribución de coherencias cuánticas multiples dado por la Ec. (4.5). Para ello, se evolucionó una cadena de 6 espines mediante H_0 con diferentes condiciones iniciales (termalizada (Ec. (4.18)) y localizada (Ec. (4.19))).

Se observa (Fig. 4.8-a) que el tamaño del cluster en función del tiempo no presenta grandes diferencias cualitativas entre ambas condiciones iniciales. El mismo presenta un crecimiento “rápido” a tiempos cortos hasta llegar a $K \sim 4$, para luego crecer de una manera más lenta hasta saturar en el tamaño de la cadena. Este comportamiento es similar para distintos tamaños de cadena N , como se puede observar para el caso de 12 espines, en la fig. 4.8. Esta simulación del cluster size para 12 espines se realizó utilizando un algoritmo basado en el paralelismo cuántico descrito en la Ref. [44] (Ver apéndice A), para un estado inicial localizado. Esta condición inicial se eligió porque es más eficiente para el cálculo numérico. Dada la equivalencia observada en el crecimiento del cluster entre ambas condiciones iniciales tratadas en este trabajo, como se muestra en la Fig. 4.8-a, nos da soporte para considerarla representativa para describir las

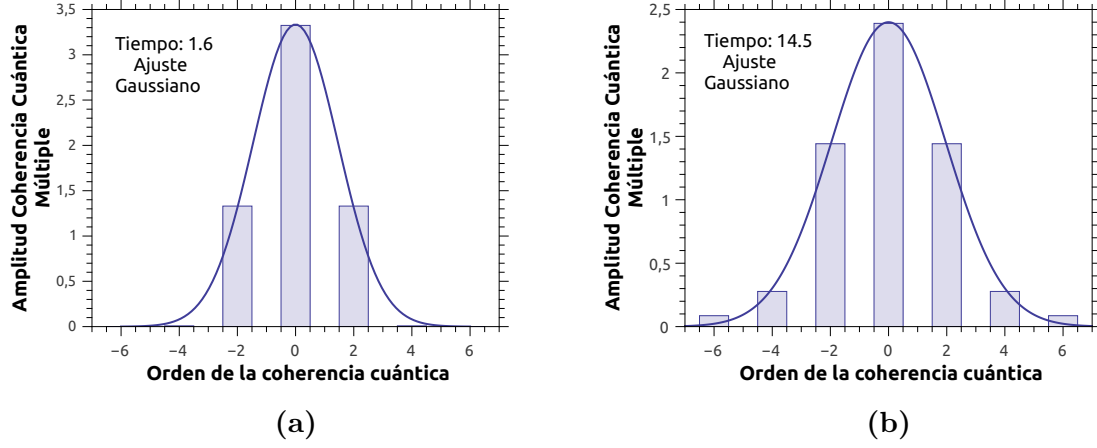


Figura 4.7: Amplitud de cada orden de coherencia cuántica múltiple para una cadena de 6 espines 1/2 con interacciones de largo alcance dadas por H_0 (Ec. (4.14)) y una condición inicial termalizada (Ec. (4.18)). Se muestran estas amplitudes para dos tiempos diferentes, (a) $t/(2d) = 1,6$ y (b) $t/(2d) = 14,5$. Las curvas sólidas representan un ajuste gaussiano (Ec. (4.4)).

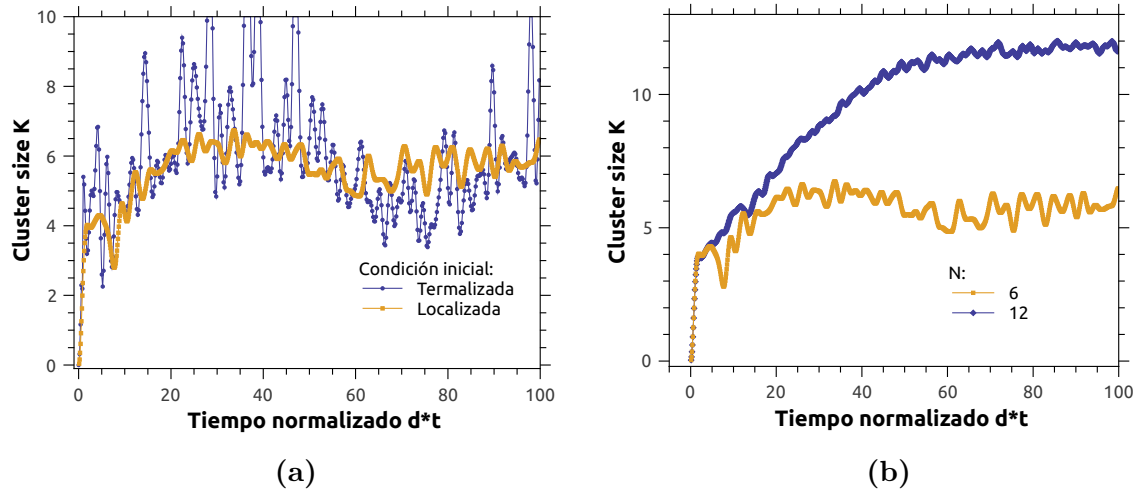


Figura 4.8: (a) Número de espines correlacionados (Cluster size) en función del tiempo para una cadena de 6 espines 1/2 con condición inicial termalizada (azul) y localizada (amarillo) al evolucionar el sistema mediante H_0 . (b) Cluster size en función del tiempo para cadenas de $N = 6$ y $N = 12$ espines evolucionadas con el hamiltoniano H_0 .

condiciones experimentales. Esto último será explotado, en capítulos posteriores, para estudiar los efectos de localización utilizando condiciones iniciales locales, que pueden ser simuladas eficientemente usando la técnica del paralelismo cuántico.

4.6. Conclusiones

En este capítulo se describieron las coherencias cuánticas múltiples, sus propiedades y aplicaciones. Se describió un modelo y algoritmo para obtener el número de espines correlacionados en el sistema K (cluster size) a partir de las mismas. Se simuló la evolución de las CCM en sistemas de 5 y 6 espines con interacciones dadas por \mathcal{H}_0 a corto y largo alcance. Se observó que la coherencia de orden cero, está relacionada a la dinámica del observable medido y por ende presenta las mismas recurrencias. Se observó que para excitar coherencias orden mayor que dos se necesitan interacciones de largo alcance.

A partir de las CCM para una cadena de 6 espines se calculó la evolución del número de espines correlacionados (cluster size) para dos condiciones iniciales, termalizada (Ec. (4.18)) y localizada (Ec. (4.19)). Se observó que el crecimiento del cluster size es similar en ambos casos, presentando mayores fluctuaciones, producto de las recurrencias en el sistema, para la condición inicial termalizada. Esto representa una ventaja a la hora de realizar simulaciones y será considerado en capítulos posteriores a la hora de hacer exhaustivo el análisis para una condición inicial determinada, sin embargo, hay otros aspectos a considerar que serán analizados en el capítulo siguiente.

Capítulo 5

Efectos de Decoherencia en Ecos de Reversión Temporal

“El pájaro rompe el cascarón. El cascarón es el mundo. Quien quiera nacer, tiene que destruir un mundo.”

— Demian - Hermann Hesse

Cuando se desea construir un hamiltoniano para realizar alguna tarea en un dispositivo cuántico surgen diferentes dificultades a superar, como por ejemplo imperfecciones experimentales intrínsecas a su generación, interacciones externas no contempladas y, relacionada a las anteriores, decoherencia de los estados cuánticos involucrados en la tarea [1, 10]. Los efectos dañinos de estas propiedades, en general se ven aumentados con el tamaño del sistema [6–9]. Surgen entonces las preguntas de cómo varía la dinámica generada, y cómo la decoherencia de los estados en función del tamaño del sistema y la magnitud de las perturbaciones e imperfecciones, afectan a la mismas.

Las respuestas a estas preguntas, se pueden afrontar a través de técnicas de resonancia magnética nuclear [1, 7]. Para ello se aplican diferentes secuencias de pulsos al sistema de espines a modo de generar un hamiltoniano efectivo sobre los mismos, que permita encarar estos problemas. Por ejemplo, el hamiltoniano \mathcal{H}_0 (Ec. (4.14)) es útil para realizar estudios donde se modifique el tamaño del sistema de manera controlada, debido a que correlaciona cuánticamente espines formando grupos (*clusters*). En un sistema de espines macroscópico, se observó que el número de espines correlacionados crece indefinidamente en función del tiempo mientras el sistema evoluciona a través de este hamiltoniano [45].

Del mismo modo, si bien este hamiltoniano puede ser generado de manera robusta mediante una serie de pulsos de radio frecuencia en un experimento de resonancia magnética nuclear, nunca se logra una evolución de manera exacta a través del mismo (u otra operación generada). En este caso, es debido a que la precisión de estos pulsos

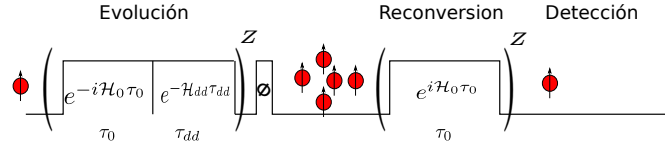


Figura 5.1: Secuencia de pulsos aplicada en los experimentos de Refs. [6, 11, 45] para generar la evolución a través del hamiltoniano perturbado \mathcal{H}_p (Ec. (5.1)). Para esto, se aplicó una serie de pulsos equivalente a \mathcal{H}_0 (Ec. (4.14)) durante un tiempo τ_0 , y luego se dejó evolucionar libremente el sistema un tiempo τ_{dd} mediante interacciones dipolares (Ec. (2.38)). Este proceso se repitió Z veces, dando un tiempo de evolución total $Z(\tau_0 + \tau_{dd})$. Seguida a esta evolución, se rota el sistema para observar las coherencias cuánticas múltiples y se reconvierte mediante Z ciclos de la secuencia que produce \mathcal{H}_0 .

es siempre finita, por consecuencia de las interacciones con el ambiente e imperfecciones experimentales [7]. Surge la pregunta análoga entonces de cómo estas imperfecciones en el hamiltoniano afectan la correlación de espines y su dinámica. Para responder esta pregunta se realizaron experimentos donde al hamiltoniano \mathcal{H}_0 se lo perturbó controladamente [6, 11, 45]. En estos experimentos se observa que por encima de un valor crítico de la perturbación, el crecimiento de los *clusters* de espines correlacionados con \mathcal{H}_0 satura [6, 11]. A este efecto se lo interpretó como un efecto de localización, donde el número final de espines correlacionados depende de la intensidad de la perturbación.

Se utilizó como perturbación el hamiltoniano dipolar \mathcal{H}_{dd} , para obtener el hamiltoniano perturbado

$$\mathcal{H}_p = (1 - p)\mathcal{H}_0 + p\mathcal{H}_{dd}, \quad (5.1)$$

donde \mathcal{H}_0 es el hamiltoniano *double quantum* y \mathcal{H}_{dd} el hamiltoniano dipolar (Ecs. (4.14) y (2.38) respectivamente). Se aplicó una secuencia de pulsos como se muestra en la figura 5.1, donde para que la aproximación de hamiltoniano efectivo sea válida es necesario que $1/d_{ij} \gg \tau_0 + \tau_{dd}$.

La diferencia en el comportamiento observado entre una dinámica que correlaciona espines indefinidamente a una localizada se puede observar a través de coherencias cuánticas múltiples (CCM), ya que éstas nos permiten calcular el tamaño de los *clusters* involucrados (capítulo 4). Se muestra el comportamiento del espectro de CCM observado en [6] en función del tiempo en la Fig. 5.2-a para una dinámica no perturbada ($p = 0$). En la Fig. 5.2-b se muestra para una dinámica perturbada cuando el valor de la perturbación es $p = 0,108$. Se muestra también el ancho del espectro de CCM en función del tiempo en cada gráfica, el cual está relacionado al número de espines correlacionados. Se observa que la expansión de las CCM se limita cuando la evolución es a través del hamiltoniano perturbado, conduciendo así a la localización en el número de espines correlacionados.

Se estudió también la reversión de la evolución partiendo de diferentes estados iniciales (donde se varió el número de espines correlacionados) en función de la perturbación. En este experimento, para cuantificar la decoherencia del sistema, se midió el

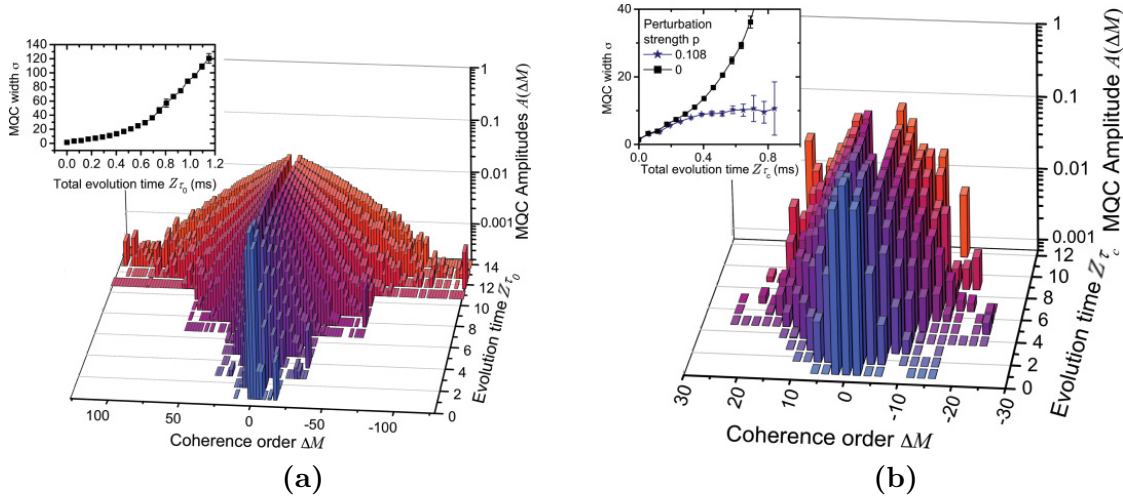


Figura 5.2: El panel principal de las figuras muestra la evolución de la distribución de coherencias cuánticas múltiples. Las figuras secundarias muestran la evolución del ancho de la distribución de CCM (σ) en función del tiempo, donde el panel (b) incluye el obtenido en (a) a modo de comparación. (a) $p = 0$ y (b) $p = 0,108$. Republicado con permiso de Alvarez, G. A., Suter, D. Localization effects induced by decoherence in superpositions of many-spin quantum states. *Physical Review A*, **84** (1), 012320, 2011.

eco obtenido sin rotar el sistema, es decir, la suma de las coherencias (como se observa al colocar $\phi = 0$ en (4.13))

$$E(t) = \langle \hat{I}_z \rangle (\tau) = \sum_M J(M, t). \quad (5.2)$$

La figura 5.3-a muestra el decaimiento del eco para diferentes valores de perturbación, donde Z_0 es proporcional al tiempo de preparación y determina el tamaño del *cluster* inicial K_0 . En este caso $Z_0 = 4$ implica aproximadamente $K_0 = 27$ espines correlacionados inicialmente. Se observa que la tasa de decoherencia se hace mayor con el tamaño de la perturbación, y que para $p = 0$ el eco no es perfecto. Esto se debe a que la perturbación introducida controladamente no es la única que afecta el sistema. A partir de estos ecos, se calcularon las tasas de decoherencia en función de la perturbación y el número de espines correlacionados inicialmente. Se consideró como tasa de decoherencia a la inversa del tiempo en el que, el eco observado normalizado por la amplitud del eco al valor Z_0 , decrece a $1/e$. Estos resultados preliminares, obtenidos en mi grupo de trabajo por Gonzalo A. Álvarez, se muestran en la figura 5.3-b. Se observa en la figura 5.3, que la tasa de decoherencia (*decoherence ratio*) aumenta con el número de espines involucrados K_0 y tiene un comportamiento cuadrático para perturbaciones pequeñas y lineal para perturbaciones mayores. La perturbación donde se produce este cambio funcional se hace cada vez más chica a medida que aumenta el número de espines correlacionados en el estado inicial.

En pos de determinar la conexión entre los efectos de localización dinámicos observados en la Fig. 5.2 y el comportamiento de la reversión temporal de estas dinámicas

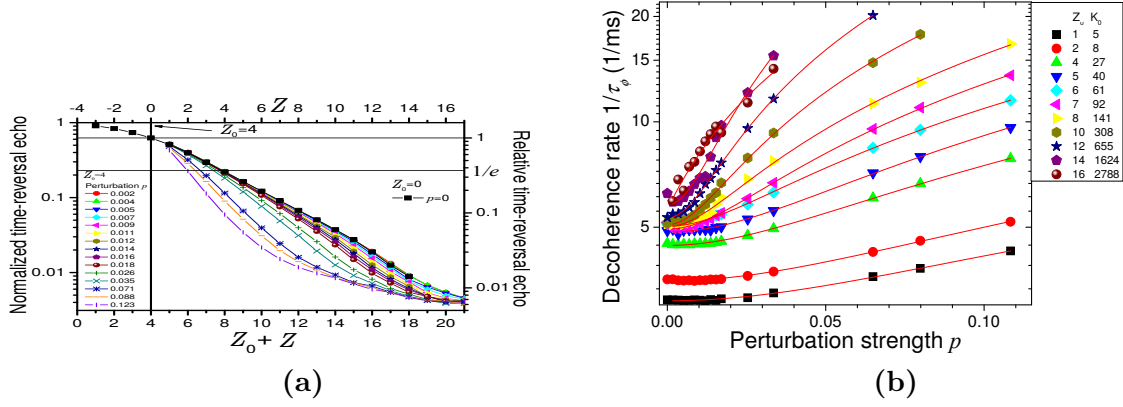


Figura 5.3: (a) Amplitud del eco de reversión temporal $E(t)$ (Ec. (5.2)) en función del tiempo. En cuadrados negros se muestra el decaimiento del eco para la reversión de la evolución no perturbada ($p = 0$), mientras que las curvas restantes corresponden a diferentes valores de perturbación. Se prepararon distintos estados iniciales de espines correlacionados. El eje inferior indica el tiempo de evolución más el de preparación del estado inicial, mientras que el eje superior solamente el tiempo de evolución. El eje izquierdo corresponde a la amplitud del eco normalizada con respecto a su valor a $Z + Z_0 = 0$, mientras que el eje derecho se encuentra normalizado por la amplitud del eco para $p = 0$ a tiempo $Z_0 = 4$. (b) Constante de decoherencia (*decoherence rate*) en función de la intensidad de la perturbación p para diferentes tamaños de *clusters* iniciales, los cuales se denotan con K_0 y se explicitan a la izquierda de la imagen. Curvas experimentales sin publicar realizadas por G. A. Álvarez, *et. al.*

observadas en la Fig. 5.3, se simulaban numéricamente situaciones experimentales similares a éstas. En particular, se consideró una cadena de espines $1/2$ evolucionando con el hamiltoniano perturbado (Ec. (5.1)), seguido de una reversión temporal con el hamiltoniano no perturbado (Ec. (4.14)) (análogamente a lo realizado en los trabajos que observaron este efecto [6]). Siendo motivados por los resultados mostrados en la figura 5.3-b, se analizó la dependencia de los tiempos de decoherencia en función de la intensidad de la perturbación. Hacemos notar la ventaja que implica poder observar los efectos de localización a través del eco de reversión temporal, donde en la Ec. 5.2 queda evidente que sólo se necesita utilizar el valor de $\phi = 0$ para determinar este observable. Para sacar información del tamaño de localización a través de las CCM, es necesario observar ecos para varios valores de ϕ , haciendo este experimento mucho más lento.

5.1. Ecos de reversión temporal

Los experimentos detallados anteriormente [6, 11], involucran evoluciones temporales a través del hamiltoniano perturbado (Ec. (5.1)), rotaciones del sistema y evoluciones a través de $-\mathcal{H}_0$ (Ec. (4.14)). Esto permite observar cómo afecta la perturbación a la primer evolución, a la cual llamaremos *forward*, y a las poblaciones y coherencias (rotando el sistema). Ya que, durante la segunda evolución (*backward* a través de $-\mathcal{H}_0$), se busca revertir la componente de la dinámica “no perturbada” para cuantificar

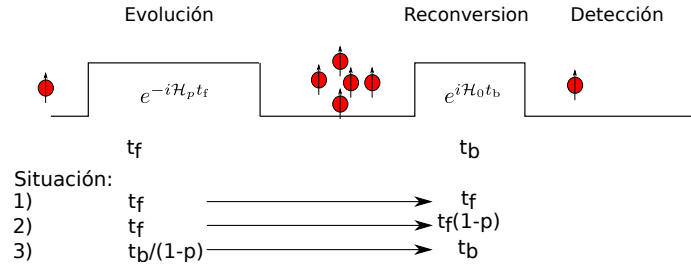


Figura 5.4: Esquema de la simulación realizada. El sistema se evoluciona un tiempo t_f a través del hamiltoniano perturbado \mathcal{H}_p (Ec. (5.1)) y luego se reconvierte la evolución del \mathcal{H}_0 (Ec. (4.14)), cambiando su signo. Para esto se evoluciona el sistema un tiempo t_b a través de $-\mathcal{H}_0$. Se detallan 3 elecciones utilizadas para el tiempo forward t_f y backward t_b .

lo efectos de la perturbación. Por esto, cuando $p = 0$, la evolución *forward* y *backward* difieren solamente en el signo del hamiltoniano, obteniendo un reversión perfecta en condiciones ideales, generando el eco de reversión temporal.

Como se observa en la figura 5.1, el tiempo de evolución y reversión temporal en el experimento no son iguales. Esto se debe principalmente a la manera en que se genera el hamiltoniano perturbado, y a que la reversión temporal busca compensar la dinámica generada por \mathcal{H}_0 solamente. Para perturbaciones chicas este tiempo extra en la evolución, se estimó que no juega un papel fundamental, y se ha visto que los fenómenos de localización aparecen incluso si este tiempo es compensado en la reversión [20].

En esta sección trabajaremos con evoluciones y reversiones considerando distintos tiempos involucrados en cada una de ellas, para representar las condiciones impuestas por los experimentos. Estas condiciones en los tiempos pueden observarse en la figura 5.4. La primera consiste en evolucionar el sistema un tiempo t_f a través de \mathcal{H}_p y revertir su dinámica el mismo tiempo ($t_b = t_f$) a través de $-\mathcal{H}_0$. Esta elección de tiempos es la natural en un análisis de irreversibilidad provocada por una perturbación en un hamiltoniano.

La segunda y tercer condición buscan imitar la situación experimental. En estas simulaciones la modificación al hamiltoniano llega a ser comparable e incluso mayor al mismo, por lo cual se investigaron estas dos posibles maneras de emular la situación. Una (la segunda) consiste en evolucionar el sistema un tiempo t_f a través de \mathcal{H}_p , y revertir la dinámica mediante una evolución a través de $-\mathcal{H}_0$ un tiempo menor $t_b = (1 - p)t_f$. El tiempo t_b se elige para compensar el peso del hamiltoniano \mathcal{H}_0 en la evolución *forward* e imitar la situación experimental. Análogamente, en el tercer esquema utilizado, se fijó el tiempo de reversión t_b mientras que el tiempo de evolución se lo eligió como $t_f = t_b/(1 - p)$.

En términos cuantitativos, lo discutido anteriormente se expresa mediante las si-

guientes ecuaciones

$$E_O(t_f, t_b=t_f) = \text{Tr}[\hat{O}e^{i\mathcal{H}_0 t_f/\hbar}e^{i\mathcal{H}_p t_f/\hbar}\rho_0 e^{-i\mathcal{H}_p t_f/\hbar}e^{-i\mathcal{H}_0 t_f/\hbar}], \quad (5.3)$$

$$E_O(t_f, t_b=t_f(1-p)) = \text{Tr}[\hat{O}e^{i\mathcal{H}_0 t_f(1-p)/\hbar}e^{i\mathcal{H}_p t_f/\hbar}\rho_0 e^{-i\mathcal{H}_p t_f/\hbar}e^{-i\mathcal{H}_0 t_f(1-p)/\hbar}], \quad (5.4)$$

$$E_O(t_f=\frac{t_b}{(1-p)}, t_b) = \text{Tr}[\hat{O}e^{i\mathcal{H}_0 t_b/\hbar}e^{i\mathcal{H}_p t_b/((1-p)\hbar)}\rho_0 e^{-i\mathcal{H}_p t_b/((1-p)\hbar)}e^{-i\mathcal{H}_0 t_b/\hbar}], \quad (5.5)$$

donde \hat{O} representa el observable medido (I_z para la condición inicial termalizada, Ec. (4.18), y $I_{1,z}$ para la condición inicial localizada, Ec. (4.19)). E_O representa la cantidad obtenida de este proceso (z ó $1, z$ respectivamente). Se observa una simetría entre la Ec. (5.4) y la Ec. (5.5), donde la evolución es la misma a menos de una redefinición temporal de la forma $t'_f = t_f/(1-p)$. Por esta razón, a continuación sólo se mostrarán las curvas obtenidas para los ecos en las condiciones 1 y 2 (Ecs. (5.3) y (5.4) respectivamente). Sin embargo, en el análisis de las tasas de decoherencia se tendrán en cuenta los 3 casos. También cabe destacar que existe la posibilidad de que esta simetría se rompa en presencia de fluctuaciones provocadas por el ambiente, este caso no se analizará en la presente tesis.

Como medida del tiempo de decoherencia del sistema, se consideró el tiempo de decaimiento del eco (a $1/e$ de su valor inicial) provocado por la reversión temporal como una medida universal e independiente de las leyes que dictan el decaimiento. Para la obtención del mismo se utilizaron distintos acercamientos: un ajuste cuadrático para tiempos cortos, un ajuste cuadrático para tiempos mayores y un ajuste gaussiano. Es decir, se estimó el tiempo de decoherencia asumiendo un decaimiento gaussiano, realizando un ajuste con la aproximación a segundo orden de la gaussiana (con la parábola) o directamente ajustando una gaussiana. Esta estimación es utilizada ya que a tiempos cortos el decaimiento se observa cuadrático pareciendo gaussiano hasta un determinado tiempo, donde la curva parece tener un comportamiento más de tipo exponencial. Luego, este decaimiento se ve interrumpido por las recurrencias provenientes de considerar un sistema finito como se observó en los capítulos previos.

5.1.1. Cadena de 5 espines 1/2 con interacción a primeros vecinos

A continuación se muestran los resultados obtenidos para las evoluciones y reversiones temporales dadas por las ecuaciones (5.3) y (5.4).

En la figura 5.5 se observan los decaimientos de los ecos para reversiones dadas por la Ec. (5.3). En las imágenes superiores (Figs. 5.5-a y 5.5-b) se utilizó la condición inicial termalizada (Ec. (4.18)) y por ende el observable medido es I_z . En las imágenes inferiores (Figs. 5.5-c y 5.5-d) la condición inicial utilizada fue localizada (Ec. (4.19)) y el observable medido $I_{1,z}$. En ambos casos se observa que el tiempo de decoherencia

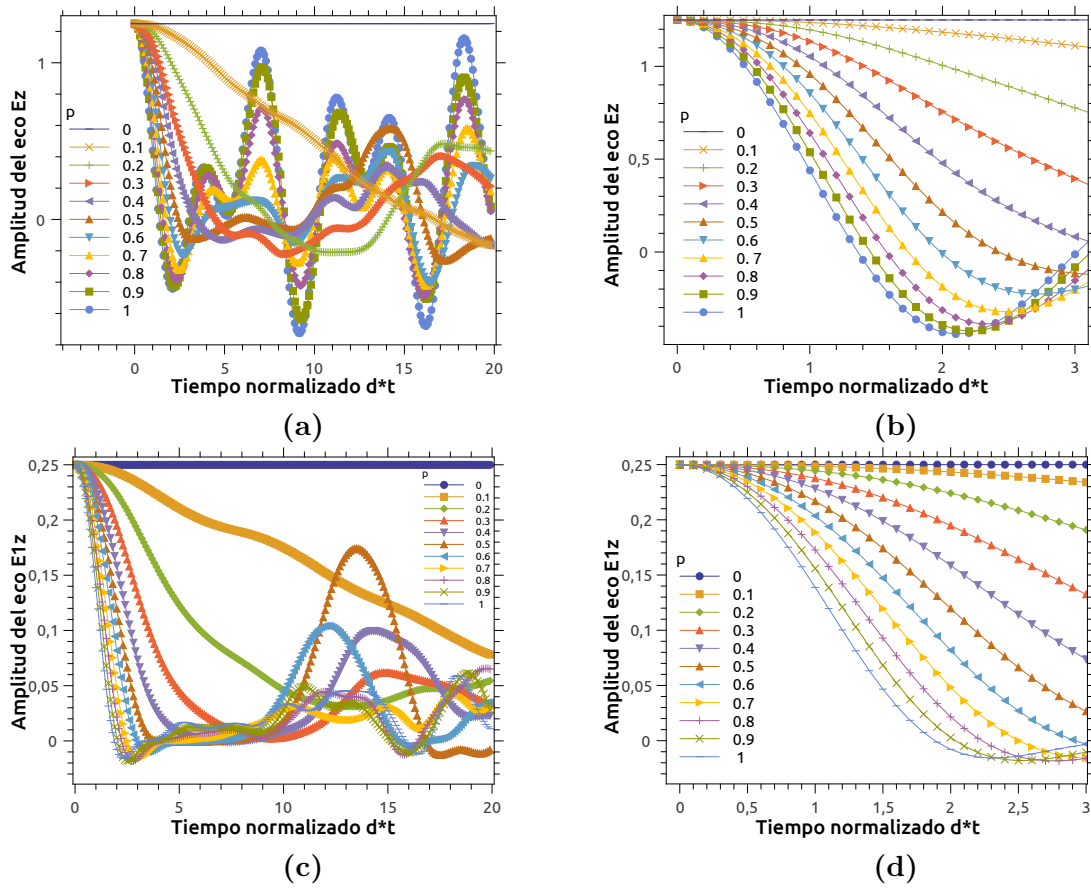


Figura 5.5: (a) Amplitud del eco de reversión temporal ($E_z(t, t)$) en función del tiempo normalizado $d \cdot t$ tras una evolución y reconversión dadas por la ecuación (5.3) para una condición inicial termalizada (Ec. (4.18)) y para diferentes perturbaciones p . (b) Ampliación del panel (a). (c) Amplitud del eco de reversión temporal ($E_{1z}(t, t)$) en función del tiempo normalizado $d \cdot t$ tras una evolución y reconversión dadas por la ecuación (5.3) para una condición inicial localizada (Ec. (4.19)) y para diferentes perturbaciones p . (d) Ampliación del panel (c).

disminuye con la perturbación, y en el caso límite ($p = 0$) se observa una reversión temporal perfecta para ambas condiciones iniciales. Para $p = 1$ se observa la dinámica de \mathcal{H}_0 para la condición inicial termalizada. Esto último se debe a que, para $p = 1$, el hamiltoniano perturbado es igual al hamiltoniano dipolar ($\mathcal{H}_p = \mathcal{H}_{dd}$) y éste conmuta con la condición inicial termalizada, viéndose entonces solo la evolución mediante \mathcal{H}_0 .

Las evoluciones dadas por la ecuación (5.4) se muestran en la figura 5.6, para ambas condiciones iniciales. Para la condición inicial localizada (Figs. 5.6-c y 5.6-d), se observa un comportamiento cualitativo análogo a las reversiones temporales dadas por la Ec. (5.3). Sin embargo, para la condición inicial termalizada (Figs. 5.6-a y 5.6-b) se presenta un comportamiento diferente al observado en los casos anteriores. En primer lugar, el decaimiento comienza cuarticamente en lugar de cuadráticamente, esto se debe a que la condición inicial conmuta con \mathcal{H}_{dd} anulando el término cuadrático en un desarrollo perturbativo. En segundo lugar, el tiempo de decoherencia desciende con p hasta un determinado valor, y luego comienza a aumentar nuevamente. En el caso límite ($p = 0$) se observa una reversión temporal perfecta, mientras que en el caso $p = 1$ no se observa dinámica. Este nuevo comportamiento se entiende a partir de que para $p = 1$ el sistema “evoluciona” con \mathcal{H}_{dd} y éste conmuta con la condición inicial por lo cual no hay evolución ya que $t_b = 0$ para este caso.

En todos los casos analizados, a partir de un cierto tiempo comienzan a observarse recurrencias en el eco, esto es producto del tamaño finito del sistema, donde las ondas de espines rebotan en los bordes (eco mesoscópico) como se mostró en el Capítulo 3.

Análisis del tiempo de decoherencia

En esta subsección se analizan los tiempos de decoherencia para las distintas condiciones iniciales y elección de tiempos de evolución, mediante ajustes cuadráticos como gaussianos. Se busca identificar si existe cierta equivalencia entre los decaimientos observados para luego realizar un análisis exhaustivo en los siguientes capítulos, con una condición inicial y elección de tiempos apropiada y eficiente para las simulaciones numéricas.

Se determinaron cuantitativamente los tiempos de decoherencia del sistema reflejados en las (Fig. 5.5 y 5.6), basándonos en los dos criterios definidos anteriormente. En la figura 5.7 se muestran ajustes representativos para dos procedimientos: ajustando por una función cuadrática de la forma $f(t) = M_0 - at^2$ y una función gaussiana de la forma $f(t) = M_0 e^{-\frac{x^2 \sigma^2}{2}}$. En la figura 5.8 se muestran los parámetros ajustados para tres situaciones, evolucionando el sistema a través de la Ec. (5.3) con ambas condiciones iniciales, y evolucionando a través de la Ec. (5.4) con condición inicial localizada. Estos parámetros de ajuste se muestran en función de la perturbación. El ajuste cuadrático se realizó para tiempos muy cortos (considerando 6 puntos) y el ajuste gaussiano para

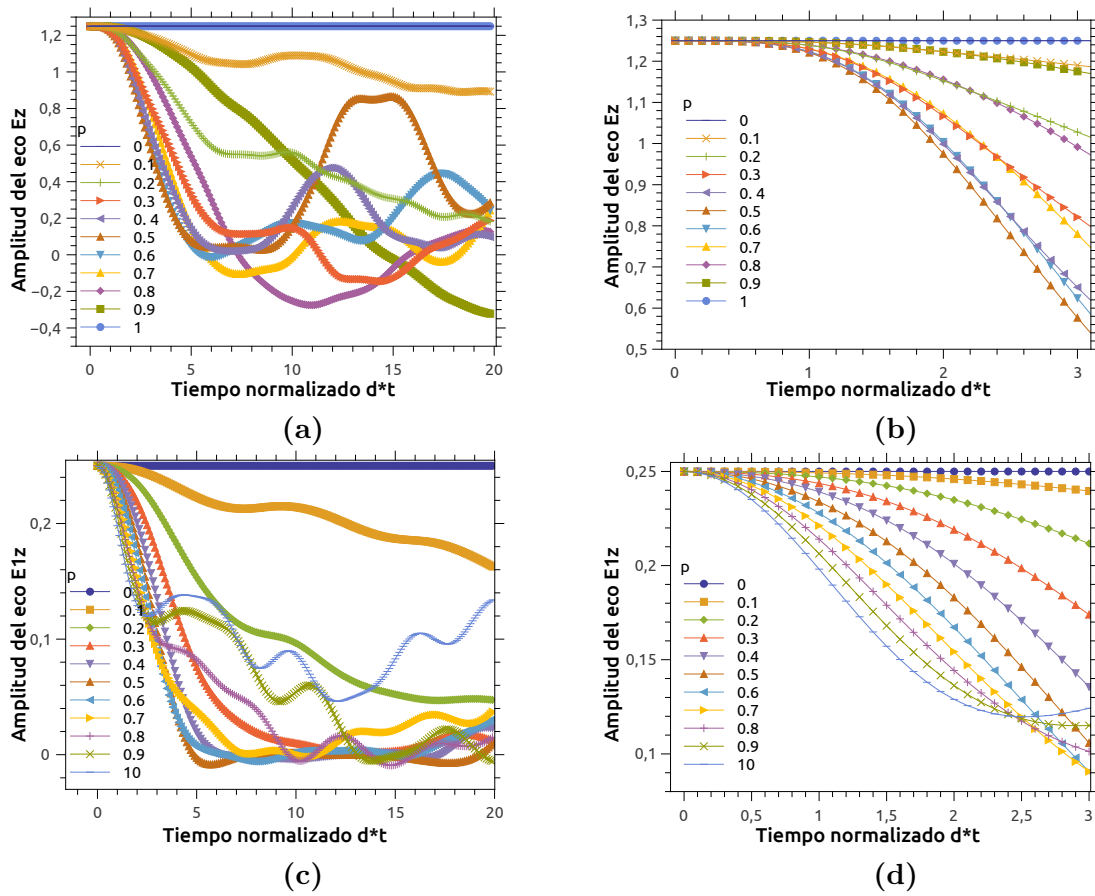


Figura 5.6: (a) Amplitud del eco de reversión temporal ($E_z(t, t/(1-p))$) en función del tiempo normalizado $d \cdot t$ tras una evolución y reconversión dadas por la ecuación (5.4). La condición inicial es termalizada y diferentes colores representan diferentes perturbaciones p . (b) Ampliación del panel (a). (c) Amplitud del eco de reversión temporal ($E_{1,z}(t, t/(1-p))$) en función del tiempo normalizado $d \cdot t$ luego de una evolución y reconversión dadas por la ecuación (5.3) para una condición inicial localizada y diferentes perturbaciones p . (d) Ampliación de la panel (c).

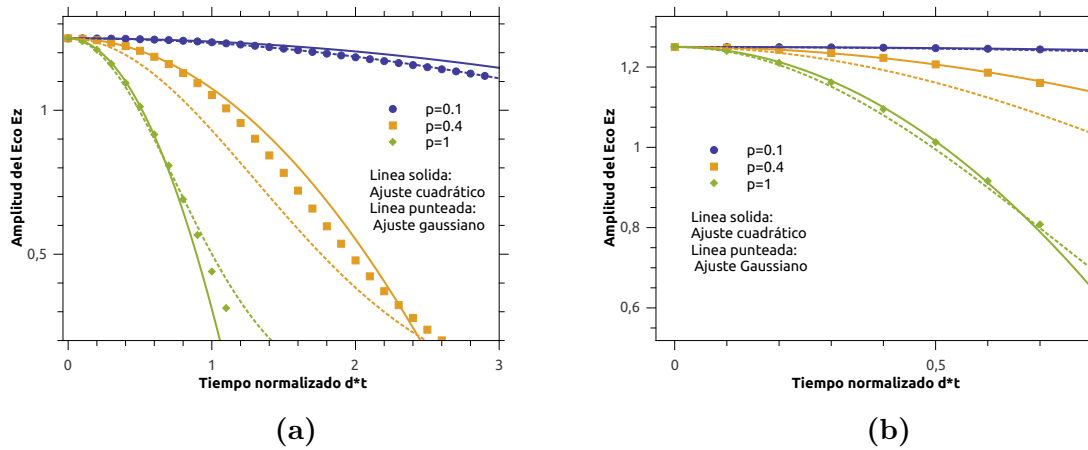


Figura 5.7: (a) Amplitud del eco en función del tiempo normalizado $d \cdot t$ para una evolución dada por la ec. (5.3) y condición inicial termalizada (Ec. (4.18)). Se muestran las curvas para tres valores de perturbación $p = 0, 1$, $p = 0, 4$ y $p = 1$ (En círculos azules, cuadrados amarillos y triángulos verdes respectivamente). Sobre los puntos se muestran los ajustes realizados. En línea sólida se muestra el ajuste cuadrático a tiempos cortos, donde se observa que a tiempos mayores, sobrestima el tiempo de decoherencia. En línea punteada se ve el ajuste gaussiano que ajusta mejor el comportamiento a tiempos largos. (b) Ampliación del panel (a).

tiempos mayores (entre 6 y 40 puntos, mientras sea representativo del comportamiento de las curvas, ver Fig. 5.7). Si bien los ajustes a tiempos cortos son “mejores” tienden a subestimar los tiempos de decaimiento, mientras que el ajuste gaussiano representa mejor este aspecto al poder incluir un número mayor de puntos en el ajuste. Un criterio para definir el tiempo de decoherencia es encontrar cuándo la señal decae a $1/e$. Sin embargo, en estos casos de sistemas con un número finito pequeño de espines, las recurrencias en la dinámica no nos permiten determinar ese tiempo claramente, ya que estas recurrencias ocurren a tiempos comparables al tiempo de decoherencia. Para estos tres casos (evolucionando y revirtiendo el mismo tiempo t_f en ambas condiciones iniciales y al revertir con $t_b = t_f(1 - p)$ con condición inicial localizada), se observa (como era esperable de las gráficas anteriores) que el tiempo de decoherencia disminuye con la perturbación. La inversa de estos tiempos de decoherencia (tasa *-rate-* de decoherencia) crece linealmente con la perturbación para perturbaciones pequeñas, y para perturbaciones mayores este aumento se hace más lento en función de la perturbación. Los valores cuantitativos de la tasa de decoherencia cambian entre diferentes condiciones iniciales y diferentes definiciones de los tiempos de ida y vuelta en la evolución, pero cualitativamente los comportamientos son semejantes.

Para los casos dados por la ecuación (5.4) con condición inicial termalizada (Ec. (4.18)) y los casos dados por la Ec. (5.5), se observa un comportamiento diferente al observado en la Fig. 5.8. Si bien para $p = 0$, el decaimiento de los ecos va a cero en consecuencia de una reversión perfecta, en este caso también para $p = 1$ va a cero, pero en este caso es debido a que no tenemos evolución. Las dependencias de las tasas de decaimiento obtenidas a través de los ajustes se muestran en la figura 5.9-a. La

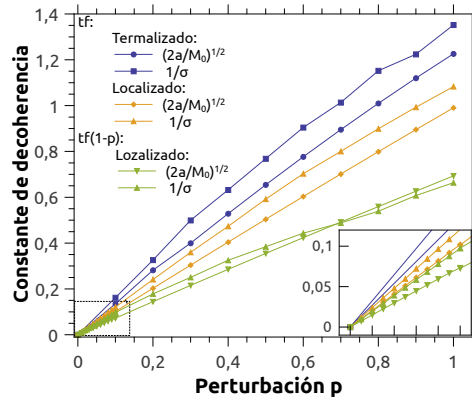


Figura 5.8: Tasa de decoherencia en función de la perturbación p calculada a partir de un ajuste cuadrático y otro gaussiano (Fig. 5.7). Se muestran los resultados de los ajustes para el caso dado por la Ec. (5.3) con ambas condiciones iniciales (Cuadrados y círculos azules, y triángulos y diamantes amarillos: ver leyenda) y el caso dado por la Ec. (5.4) para la condición inicial localizada (Triángulos verdes).

figura contiene dos curvas diferentes obtenidas para la condición inicial termalizada (triángulos y rombos verdes). Las mismas se obtuvieron mediante ajustes cuadráticos para tiempos muy cortos y tiempos mayores. Como se ve en las curvas de la Fig. 5.6-b, para esta condición inicial el decaimiento es más lento que con una ley cuadrática a tiempos muy cortos. Haciendo un desarrollo polinómico para tiempos cortos, el decaimiento vendría dado por un polinomio del tiempo $1 - t^\alpha$, con $\alpha = 4$. Por esto, ajustando a tiempos cortos se obtiene una información diferente a la ajustada a tiempos mayores, además de impedir un ajuste gaussiano confiable. Independientemente de los valores cuantitativos de los ajustes, el comportamiento cualitativamente es el mismo. Se graficaron estas mismas curvas multiplicadas por $\frac{1}{(1-p)}$ y $\frac{1}{(1-p)^2}$ respectivamente, a modo de estudiar su forma funcional motivados por las renormalizaciones de las tasas de decoherencia entre las situaciones correspondientes a las ecuaciones (5.4) y (5.5). Se observa entonces (al obtener una función lineal) que las dependencias de la constante de decoherencia en estos casos son proporcionales a $p(1-p)$ y $p(1-p)^2$ respectivamente.

Podemos concluir entonces, que el comportamiento general a tiempos cortos es similar en todas las condiciones, especialmente si se trata de perturbaciones chicas. Esto es esperable debido a la naturaleza de las condiciones iniciales y tiempos utilizados. Ya que la condición inicial termalizada puede pensarse como una “suma” de condiciones iniciales localizadas en cada espín.

Análisis del estado estacionario del decaimiento de los ecos

Las simulaciones mostradas se realizaron en sistemas finitos muy chicos, 5 y 6 espines. Consecuencia de esto, aparecen muchas recurrencias debidas a paquetes de onda que rebotan en los bordes de la cadena sucesivamente en función del tiempo. Para evitar

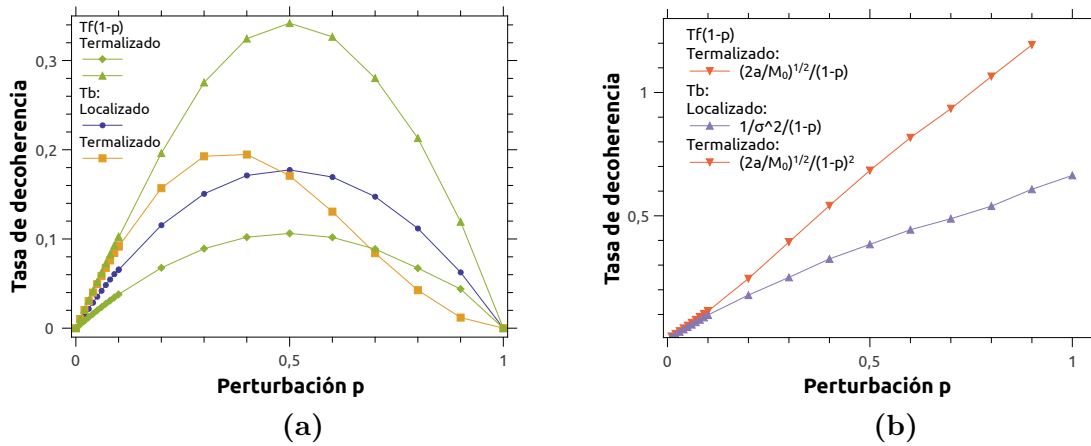


Figura 5.9: (a) Tasa de decoherencia en función de la perturbación para la evolución dada por la Ec. (5.4), con condición inicial termalizada (Ec. (4.18)). Se muestran los resultados para dos ajustes cuadráticos variando el número de puntos ajustados (Triángulos y rombos verdes, donde los triángulos representan el ajuste realizado con una cantidad mayor de puntos). Para la evolución dada por la Ec. (5.5) se muestran las tasa de decoherencia para ambas condiciones iniciales (termalizada: cuadrados naranjas, localizada: círculos azules). Estas curvas se obtuvieron a partir de una renormalización en función de p para las curvas obtenidas en el caso (5.4). (b) Se muestran las curvas de la figura (a) renormalizadas con las funciones $p(1-p)$ y $p(1-p)^2$ (ver leyenda) con el fin de observar su dependencia funcional.

estos efectos, se consideró analizar el comportamiento estacionario de los decaimientos de los ecos, ya que estos tienen información sobre como se desparrama la excitación en el sistema para diferentes perturbaciones. Eventualmente este régimen también puede contener información sobre cómo esta dinámica puede ser revertida y facilitar el análisis removiendo las fluctuaciones de la señal por efectos de tamaño finito.

Para evaluar esto, se realizaron las mismas simulaciones mostradas en las Figs. 5.5 y 5.6 hasta tiempos mucho más largos ($d \cdot t = 1000$), hasta observar que el sistema llegaba a un estado estacionario. Se calculó el valor medio y la dispersión cuadrática media para los valores del eco (figura 5.10). Se encontró un comportamiento análogo para todos los casos, no observándose diferencias para $p < 0,5$, donde el valor estacionario y la dispersión cuadrática media decrece hasta $p \simeq 0,3$ y luego comienza a aumentar tanto en valor medio como en su dispersión. Se observa una excepción a $p \simeq 0,5$, donde un comportamiento anómalo surge manifestándose en un máximo local del valor medio y de la dispersión, y además para la condición inicial termalizada donde para $p = 1$ no hay dinámica.

5.1.2. Cadena de 6 espines 1/2 con interacción a primeros vecinos

Se realizaron simulaciones para una cadena de 6 espines. Se obtuvieron resultados análogos a los obtenidos para una cadena de 5 espines para el decaimiento del eco. Esto se observó para las distintas condiciones iniciales, configuraciones de los tiempos

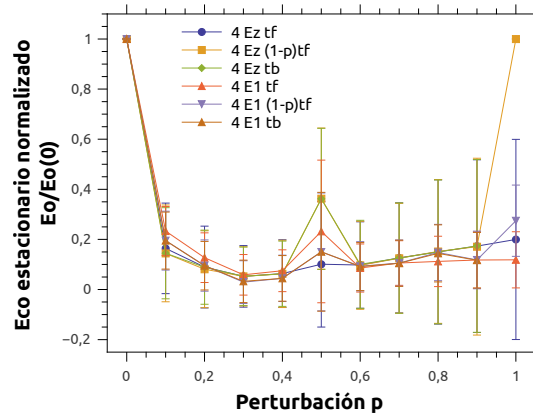


Figura 5.10: Valor medio y dispersión cuadrática media de la amplitud del eco integrada a tiempos largos (régimen estacionario) evolucionando el sistema mediante las ecuaciones (5.3), (5.4) y (5.5) con ambas condiciones iniciales.

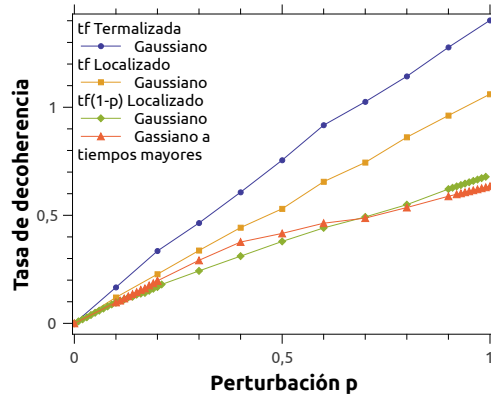


Figura 5.11: Tasa de decoherencia en función de la perturbación para una cadena de 6 espines y calculada a partir de ajustes gaussianos. Ajustes para el decaimiento del eco a través de la Ec. (5.3) para ambas condiciones iniciales en círculos azules y cuadrados amarillos (ver leyenda). Se muestran también el ajuste del decaimiento del eco a través de la ec. (5.4) para la condición inicial localizada. En este último caso se ajustó de dos maneras diferentes, teniendo en cuenta solo tiempos cortos y teniendo en cuenta tiempos mayores (rombos verdes y triángulos naranjas respectivamente).

t_f y t_b y las distintas perturbaciones. A partir de éstas gráficas, se calculó la tasa de decoherencia en función de la perturbación, las cuales se muestran en la figura 5.11 para 3 condiciones diferentes.

En todas ellas se observa un comportamiento lineal con la perturbación a perturbaciones pequeñas y, como en el caso de 5 espines, esta dependencia se hace más lenta a medida que la perturbación crece.

5.1.3. Conclusiones

En resumen, se observó que a perturbaciones pequeñas, el comportamiento cualitativo de los ecos y sus tasas de decoherencia no depende de la condición inicial y la elección de los tiempos de evolución t_f y t_b , así como los valores de equilibrio de los observables estudiados. Esto nos permitirá en los capítulos siguientes hacer un análisis

exhaustivo de una de estas condiciones iniciales. En particular utilizaremos la condición inicial localizada, ya que necesita menos tiempo para realizar las simulaciones numéricas. Por otro lado, elegiremos para los tiempos de evolución el caso utilizado en los experimentos, $t_b = t_f(1 - p)$.

Se observó que la tasa de decoherencia calculada utilizando un ajuste a tiempos mayores, es menor que la obtenida mediante un ajuste cuadrático a tiempos cortos. Esto puede deberse tanto a la presencia de recurrencias debido al tamaño finito del sistema (eco mesoscoópico), como a la presencia de otro régimen (no gaussiano) de decaimiento. Para verificar esta hipótesis en el siguientes capítulo se analizará la dependencia de los decaimientos para distintos tamaños N de la cadena.

Capítulo 6

Ecos de reversión temporal: una herramienta para monitorear dinámicas de muchos cuerpos

“ There and Back Again.”

— Bilbo Bolson

Parte del objetivo de esta tesis es analizar la conexión entre el decaimiento del eco de reversión temporal y los efectos de localización observados experimentalmente, los cuales fueron discutidos en el capítulo anterior (cap. 5). Esta conexión, que implicaría la ventaja de poder observar efectos de localización a través de un experimento más corto (eco de reversión temporal), puede manifestarse de distintas maneras, p. ej. con un cambio en el comportamiento dinámico del decaimiento del eco o con un cambio en la dependencia funcional de la tasa de decoherencia en función de la perturbación (como siguieren los datos experimentales de la figura 5.3-b), entre otras posibilidades. Con este fin, en este capítulo se hará un análisis exhaustivo del decaimiento del eco de reconversión en la magnetización $E1_z$, luego de una evolución mediante \mathcal{H}_p y una reconversión de la dinámica mediante \mathcal{H}_0 .

Se analizará la dependencia del decaimiento del eco de reversión temporal con el largo N de la cadena (i.e. tamaño del sistema), determinando la existencia de regímenes del decaimiento independientes del tamaño de la cadena. En el caso de existencia de una dependencia con N , se analizará si converge a algo independiente de N para $N \rightarrow \infty$ (límite termodinámico), ya que en los experimentos estudiados hay un número macroscópico de espines interactuando por lo que este régimen es el relevante.

Se estudiará la dependencia del decaimiento del eco con el número inicial de espines correlacionados (K_0), debido a que en trabajos previos, se ha observado tanto de forma teórica como experimental, que los sistemas cuánticos se vuelven más frágiles cuanto

mayor es el número de cuerpos involucrados [7, 11, 45].

Se buscará simular el crecimiento del número de espines correlacionados en dinámicas dadas por \mathcal{H}_p , buscando reproducir efectos de localización. Se partirá de diferentes tamaños del cluster de espines correlacionados iniciales, ya que, se observó experimentalmente que en la fase localizada de la transición de fase descrita en el cap. 5, el número de espines correlacionados llega al mismo valor de quasi-equilibrio independientemente del tamaño inicial de espines correlacionados del cual empezó la dinámica [45].

Para estas simulaciones y análisis, se utilizará que, como se obtuvo en capítulos anteriores (cap. 4-5), los decaimientos, tasas de decoherencia y crecimientos del número de espines correlacionados (cluster-size) muestran cierto grado de equivalencia a perturbaciones chicas para distintas condiciones iniciales y tiempos de evolución t_f y t_b . Entonces, en éste capítulo nos centraremos en el estudio del decaimiento del eco de reversión de la magnetización $E1_z$, en cadenas lineales de N espines, con interacciones $1/r^3$ y condición inicial local ec. (4.19). Estas condiciones nos permitirán utilizar el paralelismo cuántico [44] combinado con el algoritmo de Trotter-Suzuki [46, 47], para acceder a tamaños de cadenas mayores (hasta $N = 18$ en esta tesis). Los detalles de los algoritmos utilizados se pueden ver en el apéndice A.

Finalmente, se contrastarán los resultados obtenidos con las simulaciones del número de espines en función del tiempo, con los resultados asociados al decaimiento del eco y se contrastarán ambos con los resultados experimentales.

6.1. Análisis de decaimientos

En esta sección se observará el eco de la magnetización $E1_z$, luego de una evolución mediante \mathcal{H}_p y una reconversión de la dinámica mediante \mathcal{H}_0 para cadenas lineales de espines con interacciones $1/r^3$ para distintos tamaños de la cadena N , y diferentes números de espines correlacionados en la condición inicial K_0 .

6.1.1. Análisis de efectos de tamaño finito: variando N

Se simuló numéricamente la dinámica de reversión temporal en cadenas de N espines (Fig. 5.4) con interacciones de alcance dipolar dependientes de $1/r^3$, con r la distancia entre espines. Utilizamos una condición inicial localizada dada por la ec. (4.19), evolucionando el sistema posteriormente con el Hamiltoniano perturbado \mathcal{H}_p y reconvirtiendo/revirtiendo la dinámica mediante el Hamiltoniano sin perturbación \mathcal{H}_0 . Las figuras 6.1-a y 6.1-b, muestran el decaimiento de la amplitud de los ecos observados en función del tiempo de evolución para $p = 0,02$ y $p = 0,1$, respectivamente. Se observa que para los tiempos cortos ($t_f < 10 * 1/d$), la amplitud del eco no depende

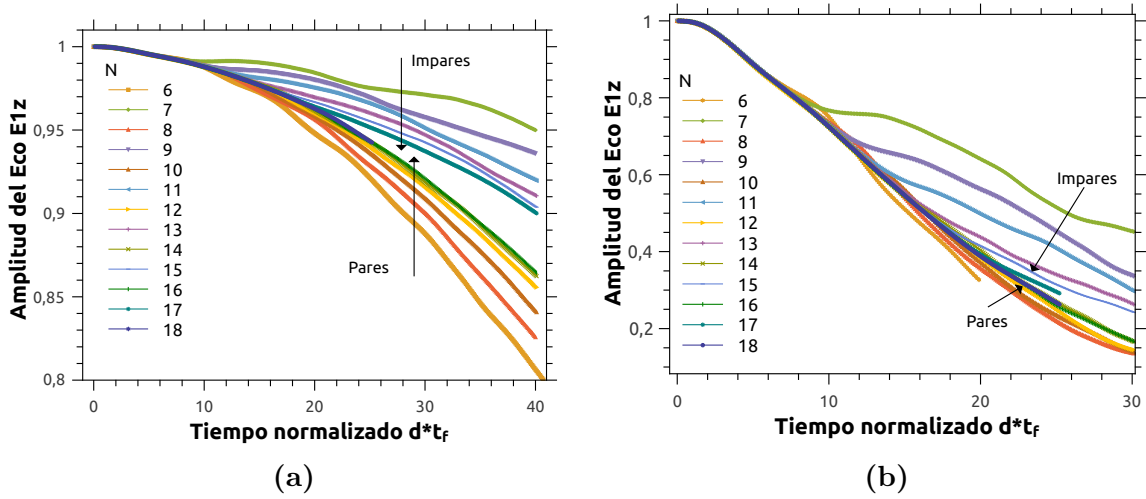


Figura 6.1: Amplitud del eco de reversión temporal ($E1_z$) en función del tiempo normalizado $d \cdot t$ para una evolución y reconversión dada por la ec. (5.4). La condición inicial es localizada (Ec. (4.19)) y los diferentes colores representan diferentes valores del tamaño del sistema N . Las curvas muestran los decaimientos de los ecos para una (a) perturbación $p = 0,02$ y (b) $p = 0,1$.

del tamaño finito N del sistema, mientras que a medida que t aumenta, se manifiestan efectos de tamaño finito, incrementándose el tiempo de aparición de estos efectos al aumentar N .

Se observan efectos con la paridad de N , donde para N impar los ecos decaen más lentamente que con N par. Esta diferencia inducida por paridad disminuye al aumentar N , aumentando la tasa de decaimiento para N impar y disminuyendo para N par, como se muestra con flechas en las Figs. 6.1.

La figura 6.2 muestra los decaimientos correspondientes a $p = \{0,02; 0,06; 0,1; 0,2\}$ para $N = \{12, 17, 18\}$, donde se puede observar que hasta $t = 10 \cdot 1/d$ no se observan efectos de tamaño finito, extendiéndose este tiempo al reducir la perturbación. Dado que no se observan efectos de tamaño finito hasta este tiempo y considerando que las simulaciones numéricas con $N = 12$ demoran un tiempo razonable para explorar distintos parámetros y regímenes, en las siguientes secciones nos concentraremos en el análisis de las evoluciones cuánticas con cadenas de $N = 12$ espines.

6.1.2. Sensitividad del decaimiento en función del tamaño inicial de espines correlacionados K_0

Para analizar como afecta el tamaño del estado inicial en el decaimiento de los ecos de reversión temporal, calculamos numéricamente el decaimiento de la amplitud del eco de reconversión temporal en función del tiempo, para una cadena de 12 espines. Modificamos, en éstas simulaciones, el número de espines correlacionados en el estado inicial, al cuál definimos como K_0 . Para ello se simulaban las dinámicas agregando un periodo inicial de preparación del número de espines correlacionados al comienzo de

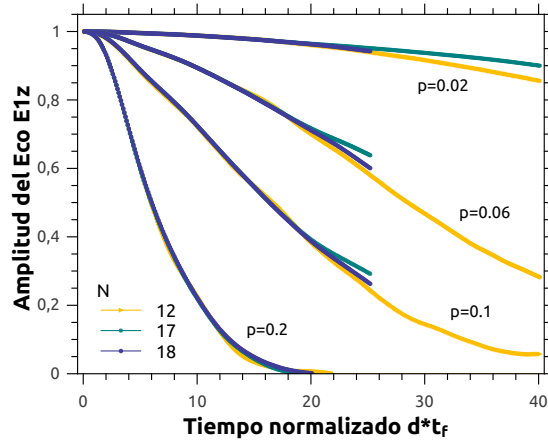


Figura 6.2: Amplitud del eco de reversión temporal $E1_z$ en función del tiempo normalizado $d * t$ tras una evolución y reconversión dadas por la ecuación (5.4) para distintos valores de p y N como se muestra en las leyendas.

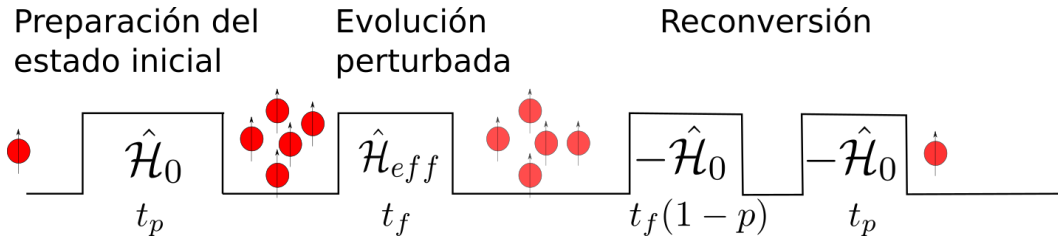


Figura 6.3: Esquema de la simulación realizada. El sistema se evoluciona un tiempo t_p con una evolución dictada por \mathcal{H}_0 creando un cluster de espines correlacionados K_0 , luego este evoluciona durante un tiempo t_f con el hamiltoniano perturbado \mathcal{H}_p (Ec. (5.1)) y finalmente se reconvierten ambas evoluciones utilizando una reversión temporal con $-\mathcal{H}_0$ (Ec. (4.14)). El sistema en ésta etapa se evoluciona durante un tiempo $t_f(1-p) + t_p$ de la misma forma que se realizaron los experimentos en Ref. [11, 45].

la secuencia, evolucionando al sistema un tiempo t_p con el Hamiltoniano sin perturbar \mathcal{H}_0 . Se agrega además para compensar esta preparación, un periodo de reconversión de esta preparación al final de la secuencia, donde el sistema evoluciona durante t_p con $-\mathcal{H}_0$ (Ver Fig. 6.3). Esta secuencia de dinámicas imita el procedimiento experimental donde se observaron los resultados discutidos en el capítulo 5. Durante el periodo de preparación, el hamiltoniano \mathcal{H}_0 genera clusters de espines correlacionados como se discutió en el capítulo 4.

La figura 6.4 muestra la amplitud de los ecos en función del tiempo t_f para distintas perturbaciones y distintos tiempos de preparación t_p , i.e., distinto tamaños del cluster de espines correlacionados K_0 inicial como se mostró en la Fig. 4.8-b. Se observa en la Fig. 6.4-a, que a medida que el tamaño K_0 inicial aumenta, el eco decae más rápido. Se observa una mayor diferencia en la tasa de decaimiento a tiempos cortos en función de K_0 , demostrando que el estado se hace más frágil al aumentar K_0 . Esto puede entenderse debido a que, a diferencia del caso donde solo el espín polarizado inicialmente siente la perturbación en la dinámica, en este caso hay un número mayor de espines correlacionados cuánticamente haciéndose más sensibles a la perturbación. En la figura

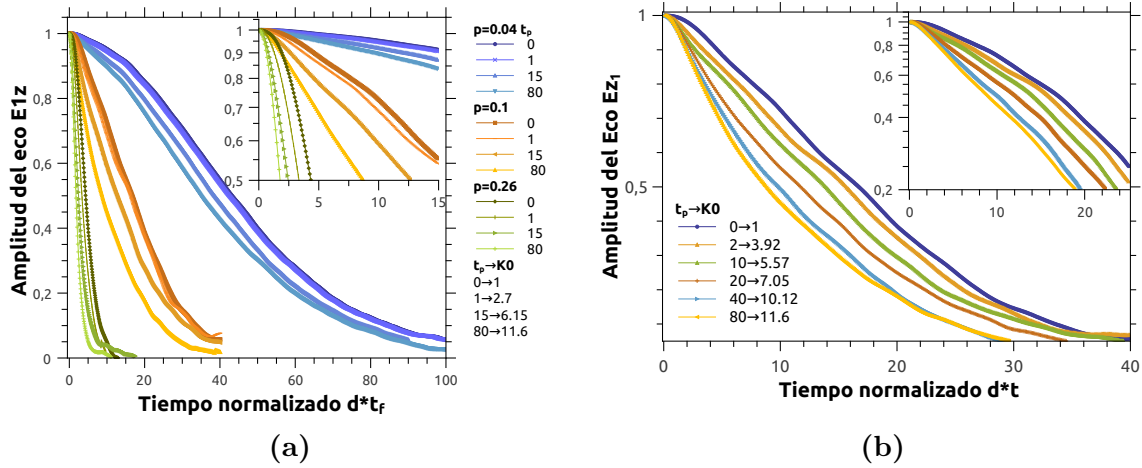


Figura 6.4: Amplitud del eco de reversión temporal $E1_z$ en función del tiempo normalizado $d \cdot t$, tras una evolución y reconversión dada por la ecuación (5.4). (a) Ecos $E1_z(t_f)$ para distintos valores de p y diferentes tiempos de preparación t_p , correspondientes a diferentes tamaños de clusters de espines correlacionados inicialmente K_0 (ver las leyendas). (b) Amplitud de los ecos $E1_z(t_f)$ en función de diferentes tiempos de preparación t_p , para $p = 0, 1$. En el inset se muestran las curvas en escala logarítmica-lineal.

6.4-b se observa que para tiempos de preparación largos ($t_p \gtrsim 60 \cdot 1/d$), la tasa de decaimiento tiende a saturar. Esta saturación se da a un tiempo asociado al momento en que el número de espines correlacionados K_0 alcanzó el tamaño del sistema $N = 12$. En este caso, si bien se puede preparar el sistema a tiempos mayores obteniendo estados cuánticos distintos, dichos estados tienen el mismo número de espines correlacionados ($N = 12$) y por ende el número de espines para sensor la perturbación es el mismo y no se observan cambios en los efectos de irreversibilidad de la dinámica entre uno y otro.

De las figuras 6.4 queda en evidencia, que hay distintos regímenes dinámicos de decaimiento de los ecos en función del tiempo, la perturbación y K_0 . En particular, observando el inset de las figuras, podemos identificar que el decaimiento inicial es cuadrático y luego se torna lineal, indicando un decaimiento exponencial del eco. Estos regímenes se analizarán en detalle en la siguiente sección.

6.1.3. Regímenes dinámicos de decaimiento de los ecos

En la Fig. 6.4 se observó un decaimiento que inicialmente decae cuadráticamente con el tiempo, para luego transicionar a un régimen que parece exponencial. En esta sección se analizarán en mayor detalle estos regímenes. Las Fig. 6.5-a y 6.5-b muestran las curvas del eco de la Fig. 6.1-a y 6.4-a respectivamente, en escala doble logarítmica (log-log), en función del tiempo. En estas curvas se observan claramente tres regímenes de leyes de decaimiento.

Analizamos primero el decaimiento a tiempos cortos, asumiendo que el decaimiento

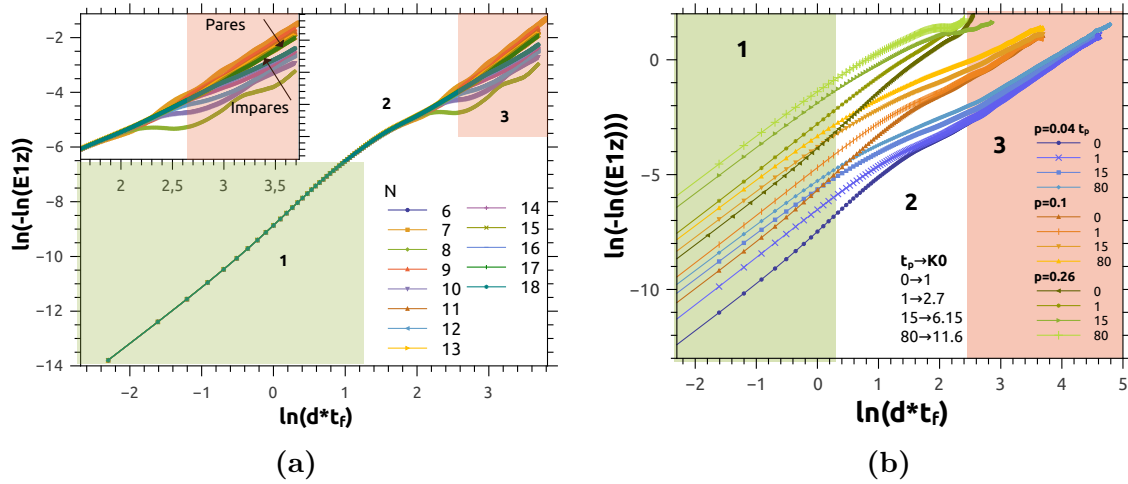


Figura 6.5: Doble logaritmo de la amplitud de decaimiento del eco de reversión temporal en función del logaritmo del tiempo t_f $\ln(-\ln(E1z(t_f))) = \alpha \ln(t_f) - \ln(\tau)$. (a) Curvas para la perturbación $p = 0,02$ mostradas en la Fig. 6.1-a para distintos valores de N . (b) Evolución de la amplitud del eco para un sistema de $N = 12$ espines, para distintas perturbaciones p y tiempos de preparación t_p (con su K_0 asociado) correspondientes a la figura 6.4-a. Tres regímenes dinámicos se muestran con zonas coloreadas. La Zona 1 tiene un decaimiento Gaussiano, la zona 2 uno exponencial, y la 3 parece Gaussiano también.

es de la forma

$$E1z(t_f) = e^{-(t_f/\tau_\Delta)^\alpha}. \quad (6.1)$$

Al aplicar dos veces logaritmo al eco y graficarlo en función del logaritmo del tiempo, obtenemos una recta de pendiente α y ordenada al origen $-\ln(\tau_\Delta)$

$$\ln(-\ln(E1z(t_f))) = \alpha \ln(t_f) - \ln(\tau_\Delta). \quad (6.2)$$

A tiempos cortos, el decaimiento es cuadrático en el tiempo, es decir tipo gaussiano con $\alpha \approx 2$ (zona 1, verde en Fig. 6.5), como es natural al realizar un desarrollo perturbativo del decaimiento:

$$E1z(t_f) = \langle e^{it_f \mathcal{H}_p} e^{it_f(1-p)\mathcal{H}_0} I_{z1} e^{it_f(1-p)\mathcal{H}_0} e^{-it_f \mathcal{H}_p} \rangle \quad (6.3)$$

$$\simeq 1 - p^2 t_f^2 (\langle \mathcal{H}_d^2 \rangle - 2 \langle \mathcal{H}_d I_{z,1} \mathcal{H}_d \rangle), \quad (6.4)$$

donde en este régimen la tasa de decaimiento es independiente de N y lineal con la perturbación $1/\tau_\Delta \propto p$.

Seguido a este régimen, se observa un decaimiento con un valor de α menor que es aproximadamente igual a 1 (zona 2, blanca en Fig. 6.5), es decir el eco decae exponencialmente durante este intervalo de tiempo. Se observa en la Fig. 6.5-a que no hay dependencia aparente con el tamaño del sistema N en este régimen.

Observamos que un tercer régimen dinámico (zona 3, roja en Figs. 6.5), esta determinado por una ley de decaimiento con un valor α cercano a 2 y presenta una

dependencia con el tamaño del sistema N .

Leyes de decaimiento y sus tiempos de transición

Identificados estos regímenes de decaimiento, se procedió a su caracterización, es decir, la determinación de sus tasas de decaimiento y tiempos en los que comienza y termina cada régimen.

Se ha observado que un comportamiento típico en sistemas cuánticos esta determinado por un decaimiento inicial cuadrático/gaussiano, seguido por un decaimiento tipo exponencial. Estos dos primeros regímenes son identificados como la zona 1 y 2 observadas en la Fig. 6.5 (ó en el inset de las figuras 6.4), y pueden ser descriptos fenomenologicamente por la expresión [48]

$$E1_z(t_f) = \exp \left\{ \frac{\Gamma^2}{2\Delta^2} - \sqrt{\frac{\Gamma^4}{2\Delta^4} + (\Gamma t_f)^2} \right\}, \quad (6.5)$$

la cual es Gaussiana a tiempos cortos ($P(t) \sim e^{-(t_f\Delta)^2}$) y exponencial a tiempos largos ($P(t) \sim e^{-(t_f\Gamma)}$). El tiempo de transición esta dado por

$$t_c = \frac{\Gamma}{\Delta^2}. \quad (6.6)$$

Dado que hay diferentes leyes, y experimentalmente es difícil obtener una serie de puntos tales que permita determinarlas en detalle, definimos una tasa de decaimiento universal e independiente de las leyes de decaimiento asociada a todo el decaimiento. Esta tasa de decaimiento queda determinada por la inversa del tiempo τ tal que la señal decae a $1/e$, i.e. $E1_z(\tau) = 1/e$. Para la expresión (6.5), este tiempo esta dado por

$$\frac{1}{\tau_e^{GE}} = \frac{\Gamma}{\sqrt{1 + (\Gamma/\Delta)^2}}, \quad (6.7)$$

donde el supraíndice GE hace referencia Gaussiana-Exponencial.

Observamos que el tiempo t_c determina el tiempo de transición entre el régimen gaussiano y exponencial. Para la determinación del tiempo donde comienza el tercer régimen, se ajustaron los decaimientos de los ecos hasta un tiempo t_a (tiempo de ajuste), y luego se calculó la desviación estándar del ajuste (STD),

$$\text{STD}(t_a) = \sqrt{\frac{\sum_{t=0}^{t_a} (y_t - E1_z(t))^2}{N_{t_a} - 2}}, \quad (6.8)$$

siendo y_t el valor del eco a tiempo t y N_{t_a} el número de puntos entre 0 y t_a . De esta forma podemos definir el tiempo de transición al tercer régimen t_3 , cuando esta desviación cambia súbitamente, manifestando que la ley dada por la ec. (6.5) deja de

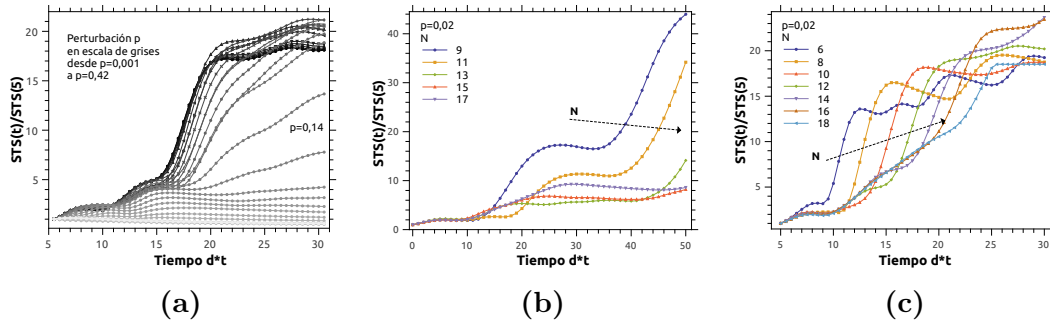


Figura 6.6: Desviación estándar $STD(t_a)$ del ajuste de la ley gaussiana-exponencial (Ec. (6.5)) a los ecos en función de límite máximo t_a del intervalo temporal en el que se hizo el ajuste. (a) Curvas para $N = 12$ y distintas perturbaciones p como muestra la leyenda. (b,c) Curvas para $p = 0,02$ y distintos tamaños de N como muestra la leyenda. N impar y par para (b) y (c), respectivamente.

ser válida.

La figura 6.6–a muestra el comportamiento de STD en función de t_a para $N = 12$ y distintas perturbaciones p . Los paneles 6.6-b y 6.6-c muestran el comportamiento de STD para $p = 0,02$ y distintos valores de N impares y pares respectivamente. Se observa que la desviación del ajuste aumenta notablemente cuando t_a es aproximadamente $10 * 1/d$ y cuando es aproximadamente $15 * [1/d]$. Esto puede deberse a oscilaciones que dependen de la simetría del sistema o tamaño finito, como se mostró en las Figs. 6.1, ó al comienzo del tercer régimen. Se observa que el tiempo al cual la STD aumenta drásticamente, se incrementa con p y con N .

Para definir cuantitativamente el tiempo donde este aumento comienza, se utilizó como criterio que la derivada segunda de la STD respecto de t_a sea igual a cero. Es decir cuando la concavidad de la curva cambia, indicando que la derivada de la misma, no solo es positiva si no que aumenta con el tiempo. La figura 6.7 muestra diferentes decaimientos de los ecos en función del tiempo y con flechas indica los tiempos donde se determino la derivada segunda de la STD igual a cero.

Se observa (Fig. 6.7) que el comienzo del tercer régimen corresponde al aumento de STD cercano a $15 * 1/d$. En las figuras 6.8 se muestra el tiempo donde comienza cada régimen tanto para $p = 0,02$ en función de N (Fig. 6.8-a), como en función de la perturbación para 12 espines (Fig. 6.8-b). Del análisis en función de N podemos concluir que el tercer régimen comienza a tiempos mayores para N impares, precedido por un decaimiento más lento del eco provocando que las tasas de decaimiento observadas sean menores. Al mismo tiempo, se observa que el tiempo asociado al cambio Gaussiano-Exponencial, es aproximadamente constante con el N , como también el cambio de concavidad cercano a $t_a = 10 * 1/d$. Para $N = 12$ y distintas perturbaciones, se observa que el tiempo al que aparece el tercer régimen aumenta con p . El tiempo de transición Gaussiano-Exponencial t_c es constante para perturbaciones pequeñas. Para perturbaciones mayores, el mismo comienza a aumentar drásticamente junto con el

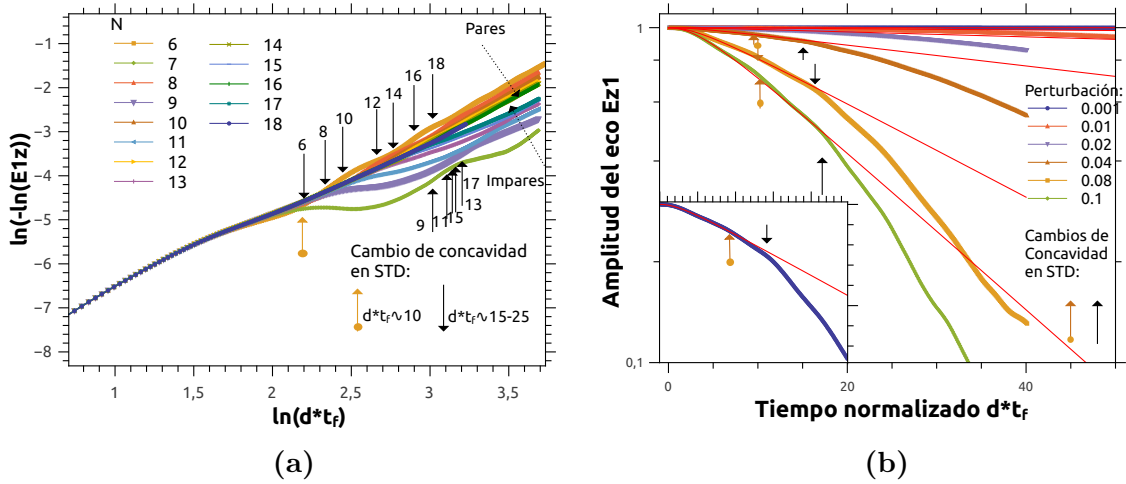


Figura 6.7: (a) Doble logaritmo de la amplitud del eco en función de logaritmo del tiempo para $p = 0,02$ y distintos N . Con flechas negras se señala el segundo cambio de concavidad (cercano a $t_a = 15 * 1/d$) y en amarillo el primero (cercano a $t_a = 10 * 1/d$). (b) Logaritmo de la amplitud del eco en función del tiempo para $N = 12$ y distintas perturbaciones, en líneas rojas los ajustes correspondientes a la ec. (6.5) hasta $t_a = 10 * 1/d$. Con flechas negro se señala el segundo cambio de concavidad (cercano a $t_a = 15 * 1/d$) y en amarillo el primero (cercano a $t_a = 10 * 1/d$).

error en su determinación. Esto se debe a que la amplitud del eco al tiempo en el cual se produce el cambio de régimen es pequeña. Se estimó, a través de análisis posteriores, que para $p = 0,16$, a tiempo t_c la amplitud del eco es igual a $1/e$.

6.2. Análisis cuantitativo de la tasa de decaimientos de los distintos regímenes

6.2.1. Análisis de la tasa de decaimiento universal a $1/e$

Condición inicial localizada y efectos de tamaño finito N

Dado que hay diferentes leyes de decaimiento para los distintos regímenes, se analizaron las tasas de decaimiento de los ecos de forma universal, $1/\tau_e$, determinadas por el tiempo de decaimiento de la amplitud a $1/e$ que es independiente de las leyes de decaimiento. Estudiamos su valor en función de N y la perturbación p . La Fig. 6.9-a muestra $1/\tau_e$ en función de p para diferentes tamaños del sistema N . Se observó una dependencia en las tasas de decaimientos a perturbaciones chicas del tamaño finito del sistema. Para perturbaciones mayores a $p = 0,1$ esta dependencia deja de observarse tornándose en una ley funcional independiente de N . Se observa, que la tasa de decaimiento es mayor para N pares que para los N impares de acuerdo a lo discutido en la subsección 6.1.1. A medida que N crece, la tasa de decaimiento disminuye para N par, pero ésta aumenta para N impar. Se observa que la dependencia de la tasa $1/\tau_e$ con la perturbación es lineal, tanto a perturbaciones chicas $p < 0,1$, como a perturba-

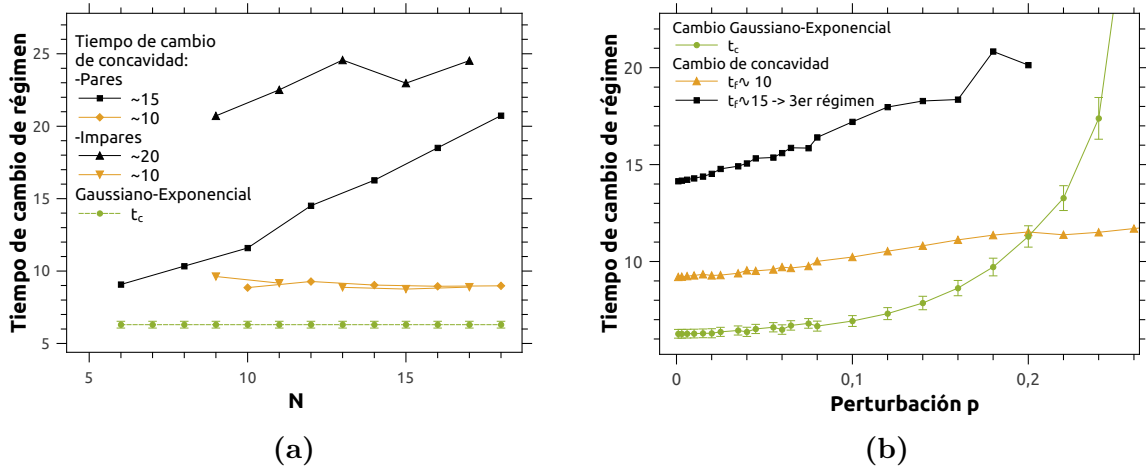


Figura 6.8: Tiempo de cambio entre regímenes. (a) Para $p = 0,02$ y distintos N . En cuadrados y triángulos negros, se muestra el tiempo en el que comienza el tercer régimen para N pares e impares respectivamente. En círculos verdes, se muestra el tiempo de transición entre los regímenes Gaussiano-Exponencial, y en triángulos invertidos y rombos amarillos, se muestra el tiempo de cambio de concavidad en la STD cercano a $t_a = 10 * 1/d$. (b) Tiempos para $N = 12$ en función de la perturbación. En rombos negro se muestra el tiempo al que comienza el tercer régimen, en círculos verdes el tiempo de transición entre gaussiano y exponencial, y en triángulos amarillos el tiempo de cambio de concavidad en el error STD cercano a $t_a = 10 * 1/d$.

ciones mayores $p > 0,1$. Sin embargo, la pendiente de estas rectas es diferente, siendo independiente de N para $p > 0,1$, y dependiente de N para perturbaciones chicas $p < 0,1$. Teniendo en cuenta que $1/\tau_e$ disminuye para N par y aumenta para N impar, pareciera indicar que en una extrapolación para N muy grande, esta recta se tornaría independiente de N , y con una pendiente diferente de la correspondiente a $p > 0,1$.

Para determinar el rol del comportamiento de $1/\tau_e$ a p chicas, donde tiene influencia el tamaño finito del sistema, se ajustó la función de decaimiento Gaussiano-Exponencial (Ec.(6.5)) hasta $t = 10 * 1/d$, régimen en el cual no se observaron efectos de tamaño finito. La tasa de decoherencia determinada por el tiempo al que decae el eco a $1/e$, de este régimen Gaussiano-Exponencial, $1/\tau_e^{GE}$, se obtuvo a través de los parámetros ajustados reemplazados en la ec. (6.7) para distintos valores p . Notar que para $p \lesssim 0,1$, este tiempo es una extrapolación del régimen Gaussiano-Exponencial que no incluye el tercer régimen. La Fig. 6.9-b muestra la tasa de decoherencia $1/\tau_e^{GE}$ de este régimen Gaussiano-Exponencial en función de p . Se observa que la misma no depende del tamaño finito del sistema N , tiene una *dependencia cuadrática con p a perturbaciones chicas* ($p < 0,1$) y se comporta *linealmente en función de p a perturbaciones mayores*, tal como se observó experimentalmente en Ref. [20] (Fig. 5.3-b).

En la figura 6.10, comparamos las tasas de decaimiento $1/\tau_e^{GE}$ y $1/\tau_e$. Consideramos $N = 12$ para $1/\tau_e^{GE}$, ya que $N = 12$ posee un mayor número de perturbaciones simuladas con respecto a los otros N , y $1/\tau_e^{GE}$ es independiente de N . Para el caso de $1/\tau_e$, incluimos las curvas con los N más grandes obtenidos, para el caso impar $N = 17$ y el par $N = 18$. En este caso, los comportamientos todavía no han llegado

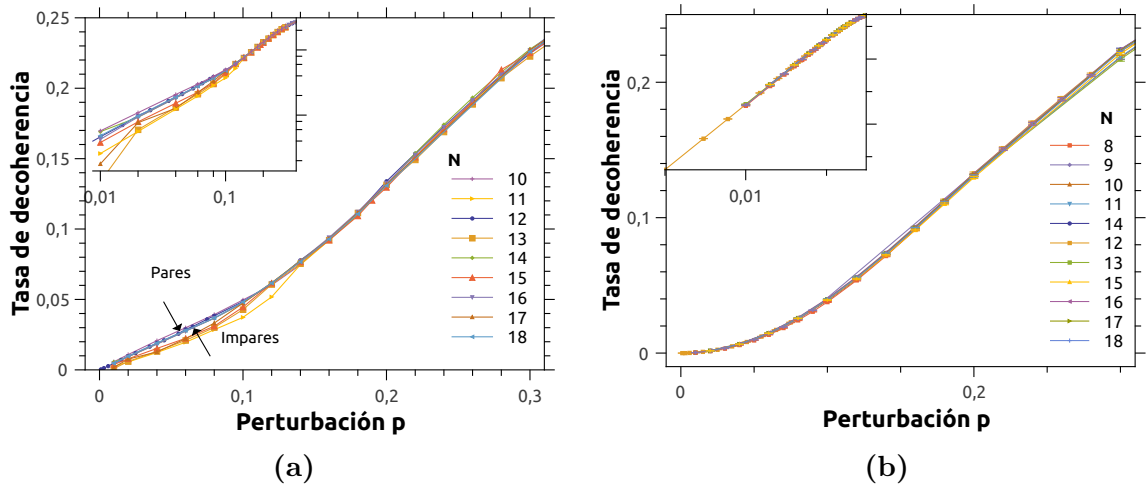


Figura 6.9: Tasas de decoherencia universal e independiente de la ley de decaimiento determinadas por el tiempo al que la señal del eco decae a $1/e$. (a) Tasa de decaimiento $1/\tau_e$ en función de la perturbación p para la evolución dada por la Ec. (5.4) con condición inicial localizada (Ec. (4.19)) para cadenas de distinta longitud N . (b) Tasa de decoherencia $1/\tau_e^{GE}$ en función de la perturbación, obtenida por el tiempo al que la señal del eco decae a $1/e$, asumiendo un decaimiento puramente Gaussiano-Exponencial. Para ello usamos los parámetros del ajuste con la Ec. (6.5) hasta un tiempo $t_a = 10 * 1/d$, y se determino $1/\tau_e^{GE}$ de la ecuación (6.7).

al régimen asintótico de N grande. Sin embargo como se observa en la Fig. 6.9, estas curvas tienden a una curva asintótica que se encontraría entre ellas. Bajo esta suposición de extrapolación basada en el escaleo de las curvas con N , se observa que las tasas de decaimiento $1/\tau_e$ que esperaríamos obtener a $N \rightarrow \infty$, no tienden a la tasa de decaimiento asintótica de $1/\tau_e^{GE}$. Esto indicaría que existencia del tercer régimen en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$), sin embargo, este régimen al aparecer a tiempos más largos con N , necesitaría, probablemente, de perturbaciones más chicas para ser observado.

Sensitividad con el tamaño inicial de espines correlacionados K_0

Se analizó la tasa de decoherencia universal $1/\tau_e$ determinada por el decaimiento a $1/e$ en función de la perturbación para distintos tiempos de preparación t_p de la condición inicial en el número de espines correlacionados K_0 . Esta tasa de decaimiento también se determinó utilizando solamente los ajustes Gaussianos-Exponenciales, i.e. $1/\tau_e^{GE}$ hasta tiempos cortos $t_a = 10 * 1/d$. Los valores obtenidos para $N = 12$ espines se muestran en la Fig. 6.11 y en ambos casos se observa que la tasa de decoherencia aumenta con el tiempo de preparación del sistema, i.e., con el tamaño del cluster inicial de espines correlacionados. La tasa de decaimiento $1/\tau_e$ en función de la perturbación a perturbaciones chicas ($p \lesssim 0,1$) es lineal con p y $1/\tau_e^{GE}$ tiene una dependencia cuadrática en este régimen perturbativo al igual que la condición $K_0 = 1$.

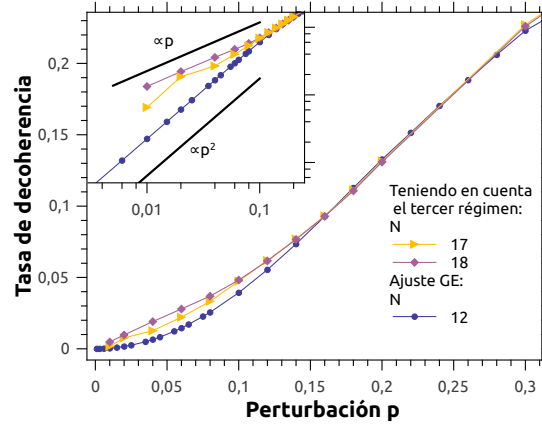


Figura 6.10: Tasa de decoherencia $1/\tau_e^{GE}$ para $N = 12$ y $1/\tau_e$ para $N = 17, 18$ en función de la perturbación para la evolución dada por la Ec. (5.4) con condición inicial localizada (Ec. (4.19)).

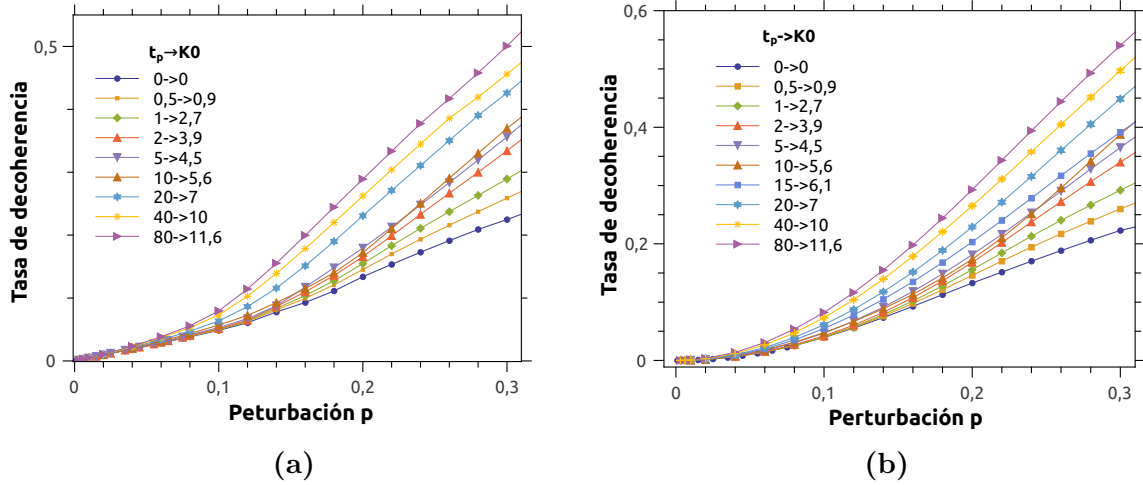


Figura 6.11: Tasas de decoherencia determinadas por el tiempo al que decaen los ecos a $1/e$ en función de la perturbación p para la evolución dada por la Ec. (5.4). Se consideró una cadena de $N = 12$ espines. Las condiciones iniciales se consideraron con distinto número de espines correlacionados K_0 , obtenidas a partir de un periodo t_p de preparación desde la condición inicial localizada (Ec. (4.19)). (a) Tasa de decoherencia obtenida a partir del tiempo en el que el eco decae a $1/e$, teniendo en cuenta el decaimiento completo del eco. (b) Tasa de decaimiento obtenida a partir del ajuste Gaussiano-Exponencial hasta un $t_a = 10 * 1/d$ (Ec. (6.5)).

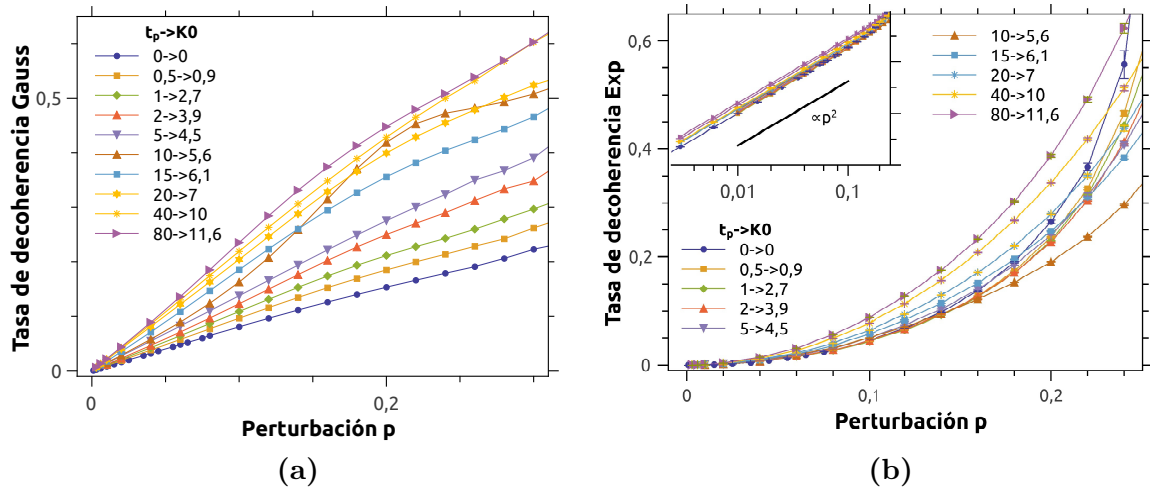


Figura 6.12: (a) Tasa de decaimiento Δ (Ec. 6.5) correspondiente al régimen gaussiano de tiempos cortos en función de la perturbación para distintos tamaños de condición inicial en una cadena de 12 espines. (b) Tasa de decaimiento Γ (Ec. 6.5) correspondiente al régimen exponencial en función de la perturbación para distintos tamaños de condición inicial en una cadena de 12 espines. Se observa un comportamiento lineal con p para Δ y cuadrático para Γ como se muestra en el inset de la figura b en escala log-log.

Análisis de los decaimiento de cada régimen

En las figuras 6.12-a y 6.12-b, se muestra la tasa de decaimiento Δ (Ec. 6.5) asociada al régimen Gaussiano inicial, y la tasa de decaimiento Γ (Ec. 6.5) asociada al régimen exponencial que lo sucede, respectivamente. Se observa que la dependencia de Δ con p es lineal, como se obtuvo perturbativamente en la ec. (6.3), donde la pendiente de la recta asociada crece con el tamaño del cluster inicial hasta llegar a un valor de saturación. La tasa de decaimiento asociada al decaimiento exponencial Γ crece cuadráticamente con la perturbación, y su dependencia con el tamaño de cluster inicial presenta un cambio de comportamiento, entre una dependencia leve con K_0 para $K_0 < 4$ a una ley de potencias para tamaños mayores.

Estos comportamientos se observan, haciendo un ajuste con $\Delta(p) = ap$ y $\Gamma(p) = bp^2$ de las respectivas curvas. La figura 6.13 muestra la pendiente a de $\Delta(p)$ y el coeficiente cuadrático b de $\Gamma(p)$ en función de K_0 .

En función de éstas dependencias, bajo el modelo propuesto en la ec. (6.5), se obtiene que $t_c = \Gamma(p)/\Delta^2(p) = b/a^2$ es independientemente de la perturbación. Esto se observó en la figura 6.8 para perturbaciones chicas ($p < 0,1$). Calculando la amplitud del eco al tiempo que se produce el cambio de régimen, se obtiene

$$Ez_1(t_c) = \exp \left(- \left(1 - \sqrt{5} \right) \frac{b^2}{a^2} p^2 \right) \simeq \exp \left(- \left(\frac{p}{0,16} \right)^2 \right). \quad (6.9)$$

Esto muestra que para $p = a/(b\sqrt{\sqrt{5}-1}) = 0,16$ (considerando $t_p = 0$), al momento t_c del cambio de régimen, el eco ya decayó a un valor $1/e$. Para perturbaciones

mayores a esta, el decaimiento es entonces principalmente gaussiano, y por ende se dificulta el ajuste del tiempo exponencial ya que hay poca señal (en el eco simulado) y por ende aumenta el error en $\Gamma(p)$ y el valor del mismo.

Se puede inferir, entonces, que la dependencia cuadrática a perturbaciones chicas de $1/\tau_e^{GE}$ está asociada al decaimiento exponencial del eco y el comportamiento lineal a perturbaciones grandes al decaimiento gaussiano en la Fig. 6.11-b. Esto se debe a que, para perturbaciones chicas, el eco no decae significativamente antes de pasar a un régimen exponencial de decaimiento, y éste último determina el tiempo al que el eco decae a un valor $1/e$. Para perturbaciones grandes, por el contrario, el decaimiento gaussiano determina el tiempo al que el eco decayó a $1/e$, sin llegar a modificarse por los otros regímenes.

Para ilustrar esto en la figura 6.14, se muestra cómo para $p > 0,16$ (para $t_p = 0$), la tasa de decaimiento $1/\tau_e^{GE}$ y $1/\tau_e$, se igualan. Para $t_p = 80 * 1/d$, el valor que se obtiene para $a/(b\sqrt{\sqrt{5}-1}) = 0,2$, y está por encima del punto donde se unen ambas curvas. En el inset de la Fig. 6.14, podemos ver que la tasa de decaimiento $1/\tau_e$ a p chicas, converge a un valor asintótico independiente de K_0 , i.e. el tiempo de preparación t_p . Esto podría indicar, que estas curvas tienden a un *régimen independiente del tamaño finito del sistema*, en concordancia con lo observado en la subsección anterior.

Las razones que justifican esta interpretación, están dadas por el hecho de que $1/\tau_e$ se hace independiente de la condición inicial y por ende la relación entre K_0 y el número de espines que define el borde de la cadena. Es decir, que los bordes no se ven. Para demostrar esta hipótesis, habría que realizar simulaciones para distintos valores de N , para verificar si estas curvas tienden a un valor asintótico independiente de K_0 en el limite termodinámico. Esto *podría estar evidenciando que a p chicas hay una fase dinámica delocalizada como se observo en los experimentos* en la Ref. [11].

Reemplazando la forma funcional $\Delta(p) = ap$ y $\Gamma(p) = bp^2$ en la Ec. (6.7) que determina $1/\tau_e^{GE}$, se obtiene

$$\frac{1}{\tau_e^{GE}} = \frac{\Gamma(p)}{\sqrt{1 + \left(\frac{\Gamma(p)}{\Delta(p)}\right)^2}} = \frac{R_k p^2}{2\sqrt{1 + \left(\frac{p}{p_c}\right)^2}}, \quad (6.10)$$

donde definimos $p_c = \frac{a}{b}$ y $R_k = 2b$, por analogía con la función *pseudo-Huber loss* que describe una forma funcional entre un regimen cuadrático a lineal con p ,

$$\frac{1}{\tau_{pseudoH}} = R_k p_c^2 (\sqrt{1 + (p/p_c)^2} - 1). \quad (6.11)$$

Esta función ha sido utilizada para analizar fenomenológicamente el cambio de comportamiento entre cuadrático a lineal en la tasa de decoherencia obtenida experimentalmente debido a que, para $p < p_c$, $\frac{1}{\tau} \approx (R_k/2)p^2$ y para $p > p_c$, $\frac{1}{\tau} \approx (R_k)p$ [20].

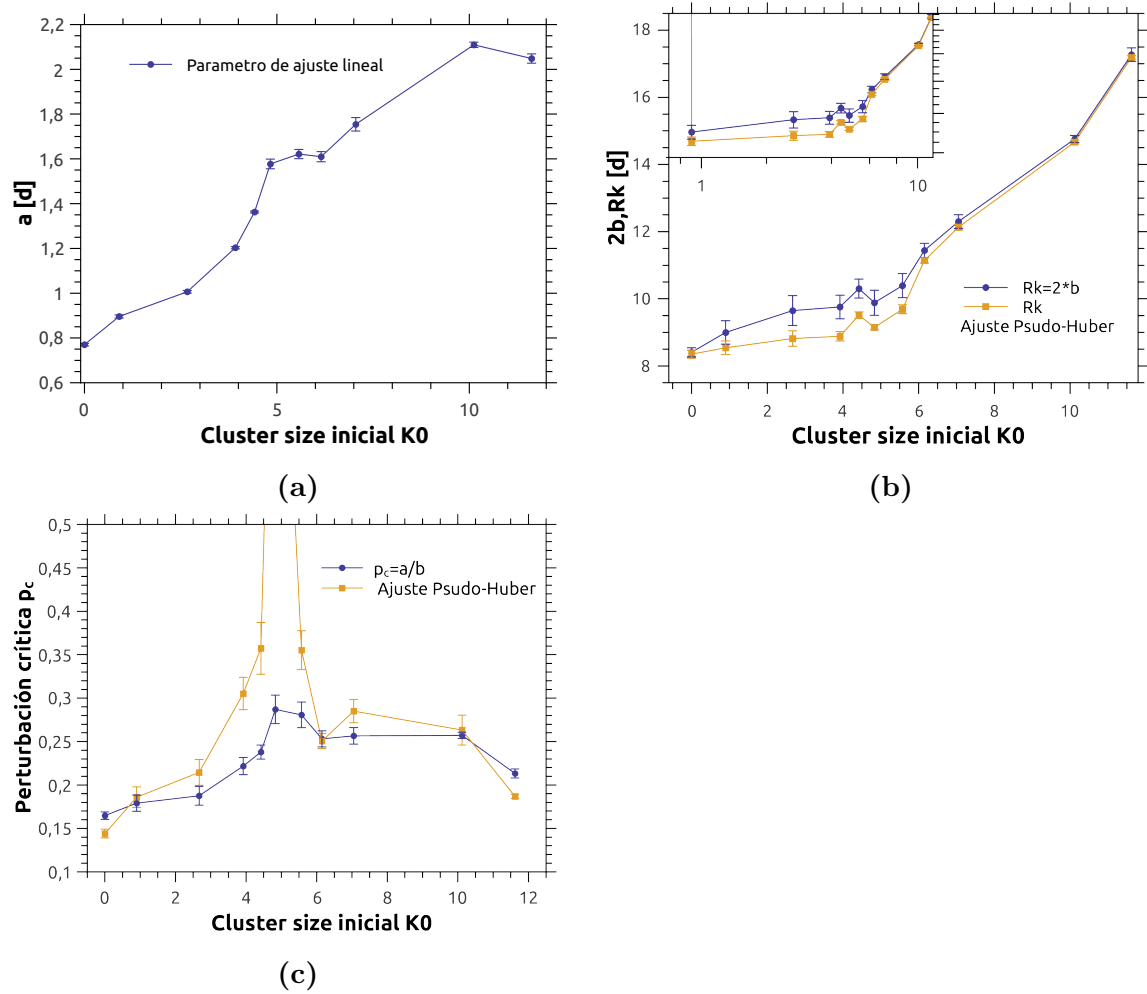


Figura 6.13: Parámetros de ajuste de las tasas de decaimiento de la Fig. 6.12 con las funciones $\Delta(p) = ap$ y $\Gamma(p) = bp^2$ y los parámetros R_k y p_c determinados por la función pseudo-Huber loss de la Ec. (6.11). (a) Parámetro a en función de K_0 . (b) Parámetro b y el valor asociado R_k en función de K_0 . Se incluye también el valor de R_k obtenido a partir de ajustar la tasa de decoherencia mediante la función Ec. (6.11). (c) Perturbación crítica p_c calculada a partir de los parámetros del ajuste Gaussianos-Exponenciales ($p_c = a/b$) y a partir de ajustar la tasa de decoherencia de la Fig. 6.11-b mediante la función Ec. (6.11) para distintos valores de cluster inicial K_0 .

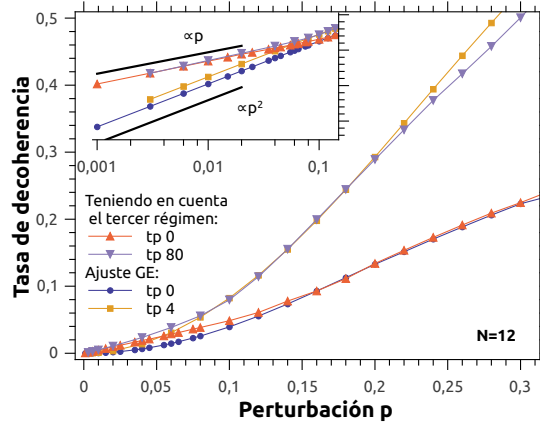


Figura 6.14: Tasa de decoherencia $1/\tau_e^{GE}$ y $1/\tau_e$ en función de la perturbación para tiempos de preparación $t_p = 0 \cdot 1/d$ y $t_p = 80 \cdot 1/d$. La evolución está dada por la Ec. (5.4) con condición inicial localizada (Ec. (4.19)) en una cadena de $N = 12$ espines.

Se ajustó la tasa de decoherencia simulada mediante la *pseudo-Huber loss function* y la expresión (6.10). Los parámetros obtenidos se muestran en la figura 6.13. En la perturbación crítica p_c , donde ocurre la transición de un régimen cuadrático a lineal en p parece tener un cambio de comportamiento a $K_0 \approx 4$ como es el caso de Γ . Se observa también un cambio a $K_0 \approx 4$ en la tasa $R_k = 2b$, donde ésta pasa de ser aproximadamente constante a tener un crecimiento del tipo ley de potencias, siendo el factor de la potencia aproximadamente $1/2$ (ver Fig. 6.13-b). Este comportamiento también ha sido observado experimentalmente en la Fig. 6.20-c.

6.3. Conectando el decaimiento de los ecos con los efectos de localización

Se simuló numéricamente la evolución del tamaño del cluster de espines correlacionados en función del tiempo para una cadena de $N = 12$ espines, con interacciones de alcance dipolar $\propto 1/r^3$ con r la distancia entre espines. Se evolucionó el sistema mediante la secuencia de la Fig. 4.2-b (con \mathcal{H}_0) y se determinó el tamaño del cluster a partir de las coherencias cuánticas múltiples (Ec. (4.4)). Se calculó el segundo momento de la expresión ec. (4.4) para determinar el cluster-size como se describió en el capítulo 4. La figura 6.15 muestra el número de espines correlacionados K en función del tiempo de evolución para distintas perturbaciones p . Se observa que el número de espines correlacionados crece cuadráticamente hasta alcanzar un valor de $K \approx 4$ independientemente de la perturbación y luego continua con una tasa de crecimiento menor, que está dada por una función lineal con t_f [49]. Este efecto se observa para diferentes valores de N , y puede que su ley se deba a un *efecto de la topología del sistema*, ya que cuando el número de espines correlacionados en 1D es 4, el número de

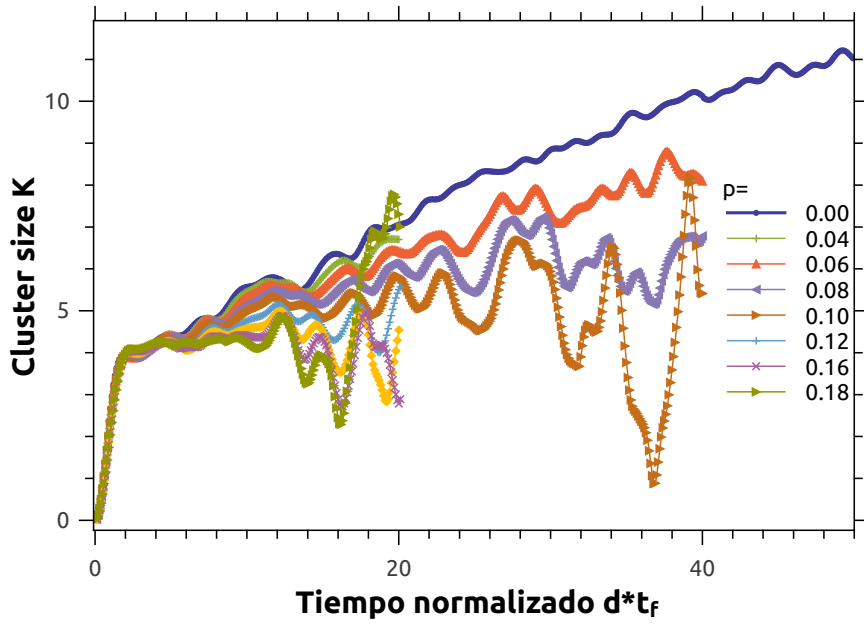


Figura 6.15: Evolución del cluster-size de espines correlacionados en función del tiempo para una cadena de 12 espines y distintas perturbaciones a la dinámica. Partiendo de una condición inicial localizada (Ec. (4.19)) y evolucionando el sistema mediante \mathcal{H}_p (Ec.(5.1)), se observan efectos de localización que dependen de p .

espines en el “volumen/bulk” del mismo pasa a ser mayor al número de espines en la “superficie” (2 espines).

La tasa de crecimiento luego de alcanzar los 4 espines decrece con la perturbación, llegando a ser cero a un tiempo que depende del valor de la perturbación p . Este comportamiento *reproduce lo observado experimentalmente* en Ref. [45]. La determinación cuantitativa del tamaño del cluster cuando localiza, i.e. donde la tasa de crecimiento se vuelve cero, se dificulta debido al ruido asociado al hecho de que el eco obtenido es pequeño y presenta oscilaciones. Sin embargo, se puede observar que *el tamaño de “localización” disminuye al aumentar la perturbación*.

Experimentalmente se observó [45], que si el sistema comienza con un tamaño inicial de cluster de espines correlacionados diferente al tamaño de localización determinado por el valor de la perturbación, la evolución del cluster-size mediante la dinámica perturbada lleva al cluster inicial a aumentar o disminuir su tamaño a fin de llegar al tamaño del cluster de localización, manifestando un equilibrio dinámico.

Motivados por este resultado, se calculó la evolución del tamaño de cluster de espines correlacionados en función del tiempo, variando el tamaño inicial K_0 utilizando la secuencia mostrada en Fig. 6.3. Los resultados se muestran en la figura 6.16 para 3 tamaños iniciales diferentes y para 3 perturbaciones. Se observa que, comenzando con tamaños iniciales menores al tamaño de localización, el cluster continua creciendo hasta llegar a este tamaño, si se empieza con un cluster mayor, el mismo parece tender a mantener el tamaño con el cual comenzó. Este comportamiento es diferente al observado

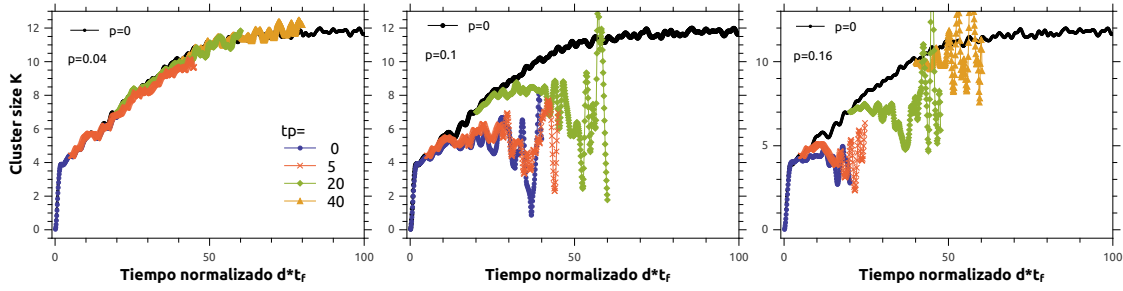


Figura 6.16: Cluster-size K en función del tiempo para una cadena de $N = 12$ espines, para distintas perturbaciones p en la dinámica y distintas condiciones iniciales K_0 correspondientes a preparar el sistema mediante una evolución con \mathcal{H}_0 durante t_p en la secuencia mostrada en Fig. (6.3).

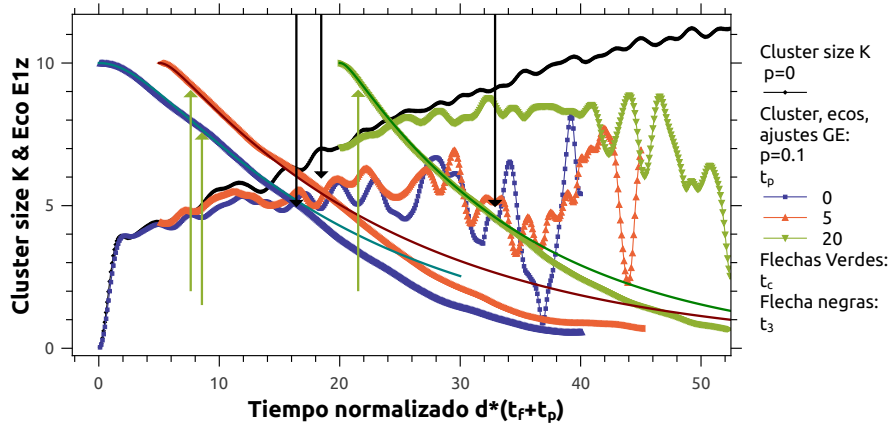


Figura 6.17: Evolución del cluster-size K y decaimiento de los ecos de reversión temporal en función del tiempo y distintas condiciones iniciales K_0 , para un cadena de $N = 12$ espines y una perturbación $p = 0,1$ en la dinámica. Sobre la curva de decaimiento de los ecos se muestra el ajustes Gaussiano-exponencial de la Ec. (6.5), y mediante flechas, los tiempos a los que empieza cada régimen de decaimiento t_c y t_3 .

experimentalmente y la diferencia puede deberse a que en la simulaciones numéricas el sistema es una cadena lineal, mientras que en los experimentos es un sistema 3D. Alternativamente, puede ser que la poca señal de los ecos está muy perturbada por el tamaño finito y las oscilaciones fuertes de este sistema 1D, y eclipsan el decaimiento al estado de localización.

6.3.1. Localización y decaimiento de los ecos

En esta subsección se buscará relacionar el efecto de localización con el comportamiento del decaimiento de los ecos discutido anteriormente. La figura 6.18 muestra el tamaño del cluster size en función del tiempo para distintos valores de K_0 , comparados con las curvas del decaimiento de los ecos de reversión temporal asociados a la misma dinámica. Sobre los decaimientos se muestra también con curvas sólidas los ajustes de la función que describe el decaimiento Gaussiano-Exponencial (Ec. (6.5)). Se muestran con flechas los tiempos donde hay un cambio de régimen de decaimiento t_c y t_3 .

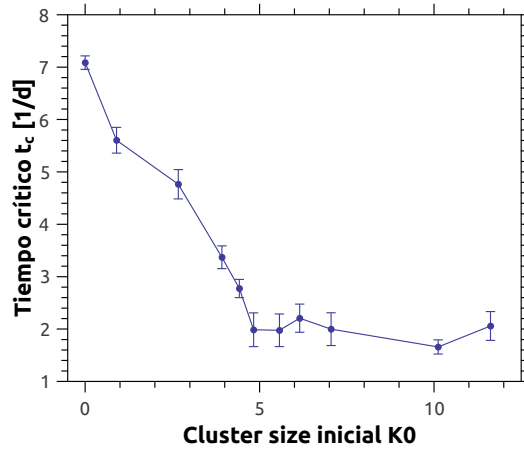


Figura 6.18: Tiempo de transición entre decaimiento Gaussiano y exponencial ($t_c = b/a^2$) del eco de reversión temporal $E1z$ obtenido en una cadena de $N = 12$ espines evolucionando mediante la secuencia mostrada en la Fig. 6.3, en función del tamaño inicial del sistema K_0 .

En la figura se observa que la *transición gaussiana-exponencial* parece estar *relacionada al cambio en la tasa de crecimiento del cluster-size*. Para corroborar cuantitativamente esta observación, la Fig. 6.18 muestra el tiempo $t_c = b/a^2$ (válido para perturbaciones chicas (subsec. 6.2.1)), en función del tamaño inicial del sistema K_0 . Se observa que el tiempo de transición entre decaimiento gaussiano y exponencial depende del cluster inicial hasta superar el tamaño $K_0 \approx 4$ en el que *el régimen de crecimiento de K cambia bruscamente*. Esto evidencia, que *esta transición depende de un cambio inducido por esta transición dinámica*. En la Fig. 6.18 se observa también que el tiempo de transición al tercer régimen t_3 parece estar conectado con el inicio del comportamiento de localización en el crecimiento del cluster-size.

6.4. Comparación con datos experimentales

Se ha observado con las simulaciones numéricas, que la *dinámica perturbada* del hamiltoniano genera *efectos de localización* en el número de *espines correlacionados* del sistema en acuerdo con las *observaciones experimentales*. Por otro lado se pudo caracterizar las tasas de decoherencia, y obtener comportamientos cualitativos equivalentes a los observados en los experimentos. Como por ejemplo la observación de una tasa de decoherencia que comienza con una dependencia cuadrática en la perturbación y se torna lineal a perturbaciones mayores basándose en el modelo gaussiano-exponencial.

Existen diferencias entre el sistema real (experimental) y el sistema utilizado en las simulaciones. El número de espines involucrados en la dinámica es significativamente diferente, donde experimentalmente interactúan decenas de miles de espines, mientras que en la simulación el número es del orden de una decena. La topología en el sistema de análisis numérico es una cadena lineal, donde cada espín tiene dos primeros vecinos,

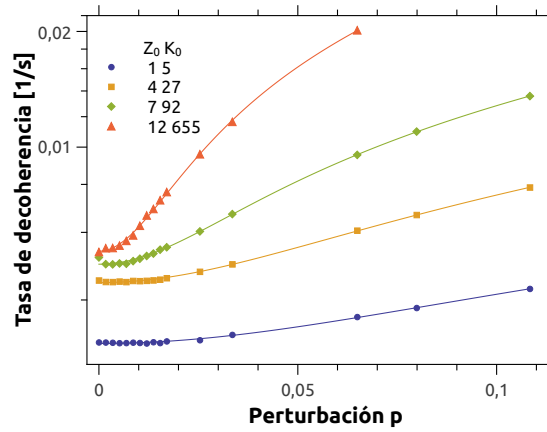


Figura 6.19: Puntos: Tasa de decoherencia en función de la intensidad de la perturbación p para diferentes tamaños de *clusters* iniciales, los cuales se denotan con K_0 y se explicitan a la izquierda de la imagen. Curvas experimentales sin publicar realizadas por G. A. Álvarez *et. al*, mediante RMN en un sistema sólido a temperatura ambiente (Ver Fig. 5.3-b)[20]. Líneas: Ajuste mediante (6.10).

mientras que el sistema real es un sistema 3D donde el número de primeros vecinos es mucho mayor. La condición inicial en el experimento es un estado térmico dado por la magnetización total del sistema, mientras que en las simulaciones de este capítulo la condición inicial es una magnetización local en la punta de la cadena. Así y todo, con las simulaciones realizadas se han podido reproducir, en mayor o menor escala, varios de los efectos observados experimentalmente. En esta sección extendemos un poco más el análisis comparativo entre las simulaciones y los resultados experimentales.

Se reanalizaron datos experimentales (medidos por G. A. Álvarez, no publicados) en función de lo discutido en las secciones anteriores. En una primera instancia se había observado experimentalmente que la tasa de decoherencia en función de la perturbación, parecía estar descrita por una función *pseudo-Huber loss* (ec. (6.11)). En este análisis se ajustó la tasa de decoherencia en función de la perturbación, tanto mediante la función *pseudo-Huber loss* como por la ecuación obtenida en este trabajo, ec. (6.10), agregándole una constante R_0 debido a efectos de decoherencia intrínseca y errores experimentales que no han sido incluidos en las simulaciones (Ver Fig. 6.19). La figura 6.20 muestra los parámetros obtenidos para ambos ajustes así como sus errores asociados.

Se observa que el parámetro R_0 es el mismo para ambas funciones de ajuste, p_c tiene la misma dependencia cualitativa, pero posee valores mayores para el ajuste mediante ec. (6.10) con respecto a la función *pseudo-Huber loss*. R_k es igual en ambos ajustes para valores de K_0 pequeños, mientras que digieren un poco para valores mayores de K_0 . El error en los ajustes es del mismo orden en ambos ajustes.

De acá concluimos que los resultados obtenidos con ambos ajustes son muy similares, ya que la variación de los parámetros entre un ajuste y otro es pequeña, así como el error de ajuste de ambos. Sin embargo, el ajuste realizado mediante la ec.

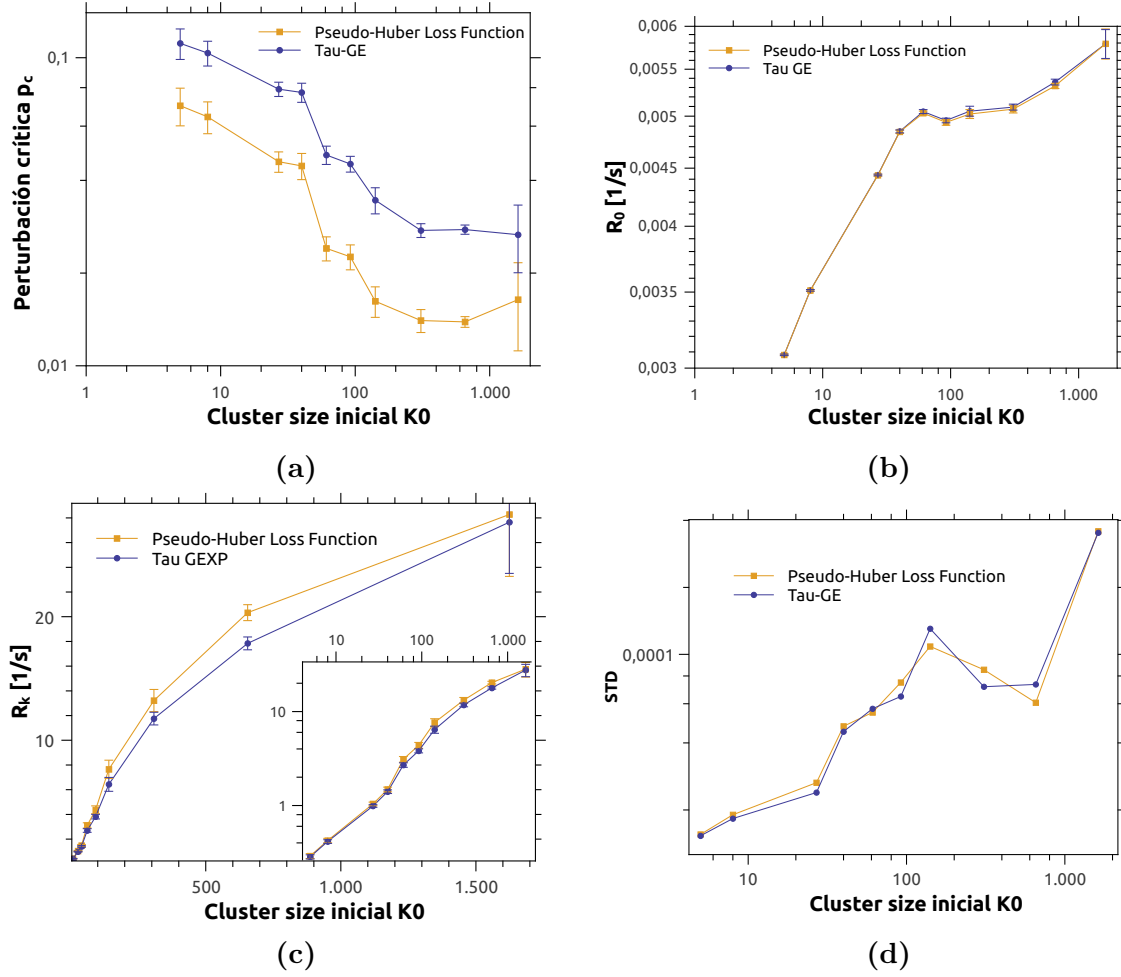


Figura 6.20: Parámetros de ajustes mediante (6.10) y (6.11) para $\tau(p)$ medido experimentalmente, mediante RMN en un sistema sólido a temperatura ambiente, para distintos tamaños de cluster inicial K_0 . (a) Perturbación crítica p_c en función de K_0 . (b) Tasa de decaimiento intrínseca R_0 en función de K_0 . (c) Tasa de decoherencia R_k en función de K_0 . En el inset se muestra la dependencia a valores menores de K_0 . (d) STD del ajuste para cada curva ajustada (K_0).

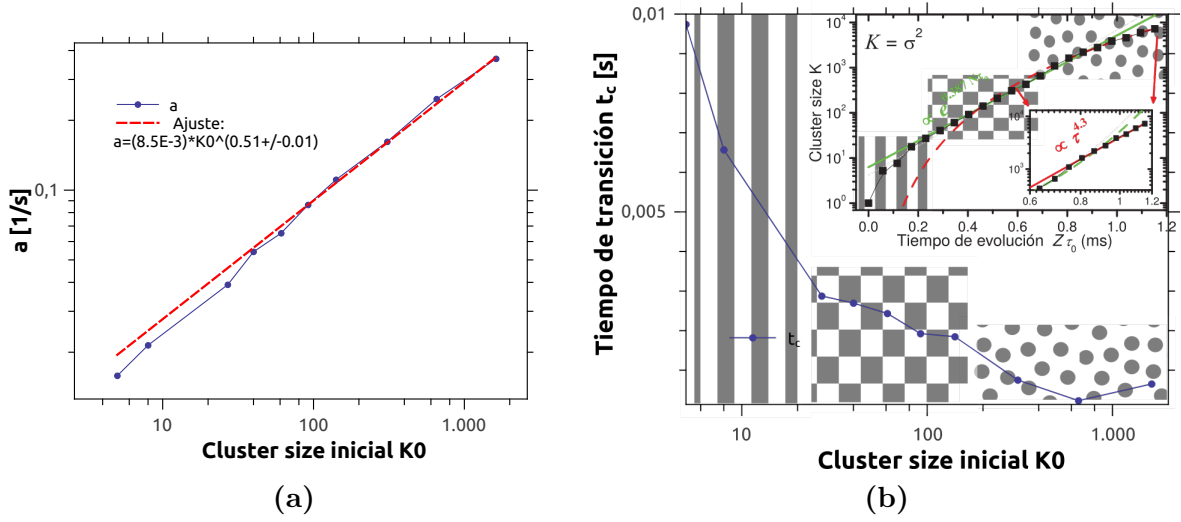


Figura 6.21: Parámetros a y t_c calculados a partir de los parámetros de ajuste de la ec. (6.10) para los $\tau(p)$ medidos experimentalmente, con RMN en un sistema sólido a temperatura ambiente, para distintos tamaños de cluster inicial K_0 . (a) Parámetro de crecimiento a de la tasa de decoherencia gaussiana a tiempos cortos con la perturbación en función del tamaño de cluster inicial K_0 . La línea a trazos muestra un fitting de una ley de potencias $\propto K_0^{1/2}$ como se muestra en la leyenda. (b) Tiempo de transición t_c entre los regímenes de decaimiento gaussiano y exponencial en función del tamaño de cluster inicial K_0 . Inset: Evolución del cluster size del sistema de espines en función del tiempo de evolución ($Z\tau_0$) con el hamiltoniano \mathcal{H}_0 . Se muestran regiones donde el crecimiento es exponencial y donde se manifiesta un crecimiento del tipo ley de potencias. Datos extraídos de la Ref. [45]. Los patrones, rayas, cuadros y lunares, separan diferentes zonas de las curvas que se correlacionan entre si..

(6.10), está respaldado por el desarrollo de un modelo y nos permite una interpretación más física de los datos. Por ejemplo, podemos asociar la tasa de decoherencia R_k al parámetro b de la tasa de decaimiento exponencial, y calcular a partir de p_c y R_k los valores del parámetro a asociado al decaimiento gaussiano y el tiempo de transición entre decaimiento gaussiano-exponencial t_c . Estos parámetros se muestran en la figura 6.21.

Al igual que en las simulaciones, se observa que existe un cambio de comportamiento en el crecimiento de R_k con K_0 , donde en este caso, en lugar de pasar de una variación pequeña con K_0 a una ley de potencias, pasa de un crecimiento exponencial a una ley de potencias (con exponente 0.5) como se muestra en la Fig. 6.21. Estos cambios pueden estar asociados a la relación de espines en el “volumen/bulk” del número de espines correlacionados frente a los que están en la superficie del mismo, donde las diferencias entre las topologías del sistema en el caso simulado y el experimental pueden tener una gran influencia. También se encuentra que el parámetro gaussiano a , crece con K_0 como una ley de potencias de exponente 0.5, pero este parámetro, a diferencia de las simulaciones, no tiende a saturar para tiempos de preparación grandes ya que el número de espines iniciales K_0 no está, a priori, limitado en los experimentos.

Calculando, a partir de estos parámetros, el tiempo de transición de decaimientos gaussiano-exponencial $t_c = b/a^2 = 2/(p_c R_k)$, se observa (Fig. 6.21-b) que el mismo

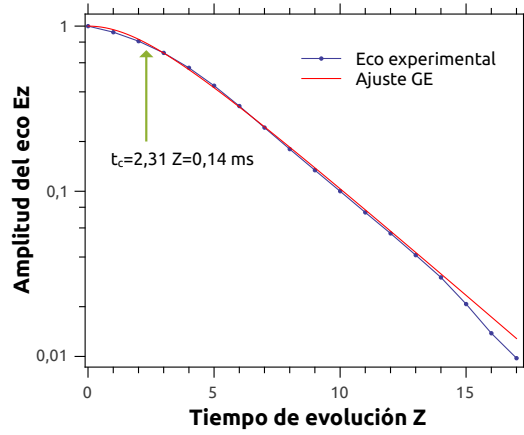


Figura 6.22: Amplitud del eco de reversión temporal $Ez(t)$ (Ec. (5.2)) en función del tiempo. En cuadrados azules se muestra el decaimiento del eco para la reversión de la evolución no perturbada ($p = 0$), mientras que en rojo la curva de ajuste Gaussiana-Exponencial (Ec. 6.5). Mediante la flecha verde se muestra el tiempo de transición t_c .

desciende con el tamaño del cluster inicial. Si bien este descenso es más rápido a valores pequeños de K_0 , con los datos utilizados no se puede concluir que el mismo llegue a un valor estacionario, como sucedió en las simulaciones numéricas. Sin embargo, el cambio parece estar asociado *al cambio en los regímenes de crecimiento del cluster* de espines correlacionados, el cual se muestra en el inset de la figura 6.21-b y fue extraído de [45] con permiso del autor. El cluster size en función del tiempo de evolución en este presenta tres regímenes, un régimen inicial, no identificado, seguido por un régimen exponencial y finalmente una ley de potencias [45], los cuales se marcaron sobre la imagen mediante patrones (rayas, cuadros, lunares, respectivamente).

La dependencia de t_c con K_0 parece reflejar estos tres regímenes, como se marcó mediante los patrones. El próximo paso, para verificar este comportamiento, sería hacer un análisis a partir del decaimiento en sí de los ecos de reversión temporal y de las curvas de crecimiento del cluster para la dinámica perturbada, como se hizo en la figura 6.17. En la figura 6.22 se muestra el decaimiento del eco observado experimentalmente para $p = 0$, ajustado mediante la ec. (6.5). Se observa que el valor obtenido para t_c concuerda con el cambio de régimen en el crecimiento de K .

El cambio producido por el cambio de régimen de crecimiento inicial a un régimen exponencial parece reflejarse tanto en t_c como en R_0 , R_k y p_c . Particularmente se observa que R_0 , a partir de $K_0 \simeq 40$, crece más lentamente.

6.5. Conclusiones

En este capítulo se estudió exhaustivamente el decaimiento del eco de reversión temporal $E1z(t)$, dado por la ecuación (5.4) con condición inicial localizada (ec. (4.19)), en una cadena de N espines. Se observó el eco para diferentes valores de perturbaciones

y valores de N . Se encontraron tres regímenes de decaimiento (Gaussiano, exponencial, gaussiano), los dos primeros independientes de N . Para $N = 12$ se estudió el decaimiento del eco variando el tamaño del cluster size inicial K_0 .

Se caracterizó cada régimen de decaimiento en función de N y K_0 , estudiando la tasa de decoherencia asociada a cada uno de ellos y la tasa global (universal) del sistema. A partir de este análisis se obtuvo una expresión para la tasa de decaimiento en función de la perturbación (ec. (6.7)). Mediante este análisis se reprodujo la dependencia de la tasa de decoherencia observada experimentalmente y se asoció la dependencia a perturbaciones chicas (cuadrática) con el régimen de decaimiento exponencial, y la dependencia a perturbaciones grandes (lineal) con el decaimiento gaussiano inicial.

Se simuló la dinámica del número de espines correlacionados en función del tiempo evolucionando con el Hamiltoniano perturbado \mathcal{H}_p . Se observaron efectos de localización y diferentes regímenes de crecimiento, reproduciendo los resultados experimentales. Se varió el tamaño inicial del cluster de espines K_0 observando que a diferencia de los resultados experimentales, si K_0 es mayor que el tamaño de localización, el cluster size se mantiene constante.

Se relacionó el tiempo de transición entre regímenes gaussiano-exponencial t_c con el cambio de régimen de crecimiento del cluster size.

Finalmente, se utilizaron los resultados derivados de las simulaciones numéricas para reanalizar y reinterpretar datos experimentales, donde a pesar de las grandes diferencias entre el sistema real y el sistema simulado se observan los mismos comportamientos cualitativos.

Esto demuestra que los datos experimentales pueden ser descriptos con estas simulaciones, y que pueden ser mejoradas aumentando la dimensionalidad del sistema.

Capítulo 7

Conclusiones

*“Finisce sempre così. Con **le conclusioni**. Prima, però, c’è stata **l’analisi**, nascosta sotto il bla bla bla bla bla. È tutto sedimentato sotto il chiacchiericcio e il rumore. Il silenzio e il sentimento. L’emozione e la paura. Gli sparuti incostanti sprazzi di bellezza. E poi lo squallore disgraziato e l’uomo miserabile. Tutto sepolto dalla coperta dell’imbarazzo dello stare al mondo. Bla. Bla. Bla. Bla. Altrove, c’è l’altrove. Io non mi occupo dell’altrove. Dunque, che questo romanzo abbia inizio. In fondo, è solo un trucco. Sì, è solo un trucco.”*

— Variación de las ultimas lineas de “La grande bellezza”, donde se cambiaron las palabras en negrita.

En el presente capítulo se hará un breve resumen de lo realizado en esta tesis, discutiendo los resultados obtenidos.

7.1. Resumen y Conclusiones

Con el fin de desarrollar herramientas adecuadas para estudiar los efectos de localización observados en los trabajos experimentales de la Ref. [6, 11], se realizaron series de simulaciones numéricas y analizaron cálculos teóricos. Se determinaron así las bases que describen estas dinámicas de espines, el comportamiento generado por los hamiltonianos involucrados, y la utilidad de las “reversiones” temporales para observar cambios dinámicos en la dinámica de estos sistemas. A continuación se hará un breve resumen del trabajo realizado y resultados obtenidos.

Se calculó la dinámica cuántica de un Hamiltoniano XY para cadenas de N espines $\frac{1}{2}$ con las siguientes características:

- Cadena de $N=2$ espines en resonancia y fuera de resonancia, es decir, con la

misma y con distinta energía. Se observó que al estar en resonancia se produce un intercambio total de magnetización entre ambos espines, mientras que fuera de resonancia, el intercambio es parcial.

- Cadena de $N=5$ espines con interacciones a primeros vecinos. Se mostró que esta dinámica puede ser mapeable a la dinámica de fermiones no interactuantes, resolviendo analíticamente la misma y contrastando este resultado con simulaciones numéricas. En esta dinámica se observa el comportamiento tipo *flip-flop* del hamiltoniano XY, donde la magnetización se propaga, como un paquete de onda, de un espín a sus vecinos conservando la magnetización total. Se consideraron dos condiciones iniciales, y se observó como la simetría de la condición inicial afecta la dinámica.
- Cadena de $N=5$ espines con interacciones de largo alcance, donde la intensidad de la interacción decrece con la distancia al cubo entre espines, i.e. $\propto 1/r^3$. Se observó un comportamiento dominante tipo *flip-flop* del hamiltoniano. Sin embargo, las interacciones a largo alcance provocan que la magnetización total se extienda a todos los espines más rápidamente. En una imagen probabilística del resultado, podemos pensar que la distribución de probabilidad de encontrar un espín magnetizado tiende a uniformizarse.

Se simuló la evolución de las coherencias cuánticas múltiples para cadenas de $N=5$ y $N=6$ espines, descrita por un hamiltoniano “double-quantum”, \mathcal{H}_0 . Se consideraron interacciones a primeros vecinos e interacciones de largo alcance $\propto 1/r^3$. Se observó que este hamiltoniano excita coherencias de orden par, lo cual se explica a partir del comportamiento *flop-flop* del hamiltoniano “double-quantum”, que invierte simultáneamente dos espines de igual momento magnético. La simulación se realizó para dos condiciones iniciales (termalizada con un campo estático ρ_T , y localizada en uno de los espines ρ_L).

El resultado de la evolución numérica de cadenas de espines con condición termalizada se comparó con el resultado analítico obtenido por Doronin *et al.* [43] demostrando ser equivalentes. Para una cadena de $N=6$ espines se realizó un histograma de las coherencias cuánticas múltiples el cual se ajustó mediante una gaussiana calculando el número de espines correlacionados para dos tiempos determinados. Esto demostró ser una medida razonable del número de espines correlacionados.

Se calculó entonces el número de espines correlacionados a partir del segundo momento de la distribución de coherencias cuánticas para ambas condiciones iniciales (termalizada y localizada) observando un comportamiento similar entre ambas, donde para tiempos largos saturan a un número de 6 espines correlacionados (tamaño de la cadena). Esto nos permitió posteriormente estudiar los efectos de localización utilizando condiciones iniciales locales que son más eficientes de calcular numéricamente.

Se simularon dinámicas de evoluciones y reversiones temporales, donde se midió el eco de reversión temporal a través de un determinado observable. Las evoluciones, se simularon a través de un hamiltoniano de control perturbado \mathcal{H}_p , y las reversiones temporales con el hamiltoniano de control sin perturbar \mathcal{H}_0 . Esto se realizó, en sistemas pequeños (cadenas de 5 y 6 espines) para distintas combinaciones de tiempo de evolución para adelante (t_f) y de reversión (t_b), y distintas condiciones iniciales (ρ_T y ρ_L) en cadenas de $N=5$ y $N=6$ espines para distintos valores de perturbación p . Se observó un decaimiento del eco en función del tiempo de evolución y que éste es mayor al aumentar la perturbación. La tasa de decaimiento de estos ecos se la consideró como una medida de la tasa de decoherencia del sistema inducida por la perturbación.

En las simulaciones anteriores, para perturbaciones chicas, no se observaron grandes diferencias entre los distintos casos considerados a excepción del caso de una condición inicial termalizada y $t_b = (1 - p)t_f$, donde el decaimiento comienza como $1 - t^4$ en lugar de $1 - t^2$ como para todos los demás casos. Esto se debe a que la condición inicial conmuta con H_d y no afecta la dependencia (lineal) de la tasa de decoherencia a tiempos cortos con la perturbación. En estos sistemas pequeños, la tasa de decoherencia se calculó a través de una extrapolación del decaimiento observado a tiempos cortos, ya que los efectos de tamaño finito (oscilaciones inducidas por los extremos de la cadena) impedían observar directamente el valor del eco de reversión ya que éste se mezclaba con el eco mesoscópico.

Basados en la “equivalencia” observada entre las distintas condiciones utilizadas en estas simulaciones, se determinó que:

- (i) Los ecos, utilizando la condición implementada en los experimentos $t_b = (1 - p)t_f$ son similares a los obtenidos con $t_b = t_f$ para p chicas, por lo que se procedió a simular con $t_b = (1 - p)t_f$ como en los experimentos.
- (ii) Las dinámicas de los ecos de reversión temporal y del cluster de espines correlacionados son similares para una condición termalizada (como en los experimentos) y una localizada (eficiente de simular numéricamente), por lo que se utilizó la opción menos costosa numéricamente para estudiar los comportamientos de la dinámica de espines. Basados en estas hipótesis, se simularon los decaimientos de los ecos utilizando entonces la condición inicial localizada, y $t_b = (1 - p)t_f$, para distintos tamaños de la cadena (hasta $N = 18$).

Se implementó un algoritmo basado en Trotter-Susuki combinado con técnicas basadas en el paralelismo cuántico para poder simular dinámicas de espines con $N > 10$ [44, 46, 47]. Se observó que los efectos de tamaño finito disminuyen al incrementar N y se identificó un régimen donde no hay efecto de tamaño finito. Se observó, tanto para distintas perturbaciones como tamaños de la cadena, que el decaimiento de los ecos tiene tres regímenes dinámicos que suceden a distintos intervalos de tiempo: Gaussiano a tiempos cortos, luego exponencial y a tiempos largos nuevamente gaussiano.

Se modeló un decaimiento Gaussiano-Exponencial (Ec. (6.5)) para describir los dos primeros regímenes temporales y se observó que estos son independientes del tamaño del sistema. En función de este modelo, se determinó la tasa de decoherencia ($1/\tau_e^{GEXP}$) definida por el tiempo al que decaería la señal $1/e$, si el modelo es extrapolable a todo tiempo. Se observó que la misma depende cuadráticamente de la perturbación para perturbaciones pequeñas y linealmente para perturbaciones grandes. Esta dependencia mapea el comportamiento observado experimentalmente.

Se determinó además la tasa de decoherencia ($1/\tau_e$), definida como el tiempo al que decae la señal de los ecos simulados a $1/e$, para obtener una medida independiente de las leyes dinámicas que gobiernan el decaimiento. En este caso, para perturbaciones pequeñas, la tasa de decoherencia se ve determinada por el tercer régimen de comportamiento gaussiano. Esta tasa muestra ser dependiente con N (donde los N pares tienen tasas mayores que los impares) y mostró depender linealmente con la perturbación tanto para p chicos ($p < 0,16$) como para p mayores, conteniendo pendiente diferentes en cada caso. Se observa que al aumentar N , las curvas $1/\tau_e(p, N)$ tienden a una curva común, independiente de la paridad de N , pero diferente a la curva obtenida del modelo Gaussiano-Exponencial $1/\tau_e^{GE}(p)$. Esto indicaría la existencia de un tercer régimen de decaimiento incluso para tamaños de N grandes, que sería válido en el límite termodinámico que asumimos describe la condición experimental.

Se caracterizaron los tiempos a los cuales aparece cada régimen dinámico de decaimiento, así como la tasa de decoherencia asociada a cada uno de ellos. Se observó, que el tiempo de transición entre el decaimiento gaussiano de tiempos cortos y el exponencial es independiente de N y de p para $p \lesssim 0,16$. Se observó que el tiempo de transición entre el régimen gaussiano y exponencial (para $p \gtrsim 0,16$), al igual que el tiempo al cual comienza el tercer régimen, aumenta con la perturbación (a N fijo). Se encontró, que el tiempo al cual comienza el tercer régimen se incrementa al aumentar N , siendo éstos mayores para N impares.

Se consideraron distintas condiciones iniciales basadas en un cambio del “tamaño” del número de espines correlacionados K_0 imitando experimentos previos [45]. Se observó que la tasa de decoherencia es mayor cuanto mayor es el tamaño de la condición inicial K_0 y se observaron los tres regímenes dinámicos observados para una condición inicial localizada, i.e. $K_0 = 1$. Analizando las tasas de decoherencia del modelo gaussiano-exponencial, se observó que la tasa asociada al decaimiento gaussiano es lineal con la perturbación (como se obtiene perturbativamente) mientras que la tasa de decaimiento exponencial crece cuadráticamente con la perturbación. Utilizando estas dos dependencias se desarrolló un modelo de la tasa de decoherencia $1/\tau_e^{GE}$, determinada por el tiempo al cual el modelo (Gaussiano-Exponencial) predice un decaimiento

del eco a $1/e$, en función de la perturbación

$$\frac{1}{\tau_e^{GE}} = \frac{\Gamma(p)}{\sqrt{1 + (\frac{\Gamma(p)}{\Delta(p)})^2}} = \frac{R_k p^2}{2\sqrt{1 + (\frac{p}{p_c})^2}}, \quad (7.1)$$

donde se definió $p_c = \frac{a}{b}$ y $R_k = 2b$ (Ec. (6.10)). Con este modelo pudimos ajustar los datos experimentales, que antes se los había ajustado de forma fenomenológica.

Se estudió cómo varía el número de espines correlacionados en función del tiempo para distintas perturbaciones, donde se observaron efectos de localización en el número de espines correlacionados tal como se observa experimentalmente. También se observa un cambio en la ley de crecimiento del cluster de espines de un crecimiento cuadrático en el tiempo hasta $K = 4$ a un crecimiento lineal en función del tiempo a partir del mismo. Experimentalmente también se observan distintos regímenes de crecimiento del cluster. Se asume que éste es un efecto de transición entre una dinámica de crecimiento gobernada por una relación superficie/bulk muy alta a tiempos cortos, a una muy chica a tiempos largos.

Se simuló también el crecimiento del tamaño de cluster de espines correlacionados en función del tiempo partiendo de un número finito de espines correlacionados K_0 inicialmente para distintas perturbaciones. Se observó que cuando K_0 es menor que el tamaño al cual localiza el sistema, el cluster continúa creciendo hasta alcanzarlo. Sin embargo, si K_0 es mayor que el tamaño de localización del sistema, parece que el número de espines correlacionados no decrece hasta alcanzar el valor de localización si no que se mantiene constante. Esto parece indicar una diferencia con lo observado experimentalmente, ya que se observó que sin importar el valor de K_0 , el sistema siempre converge al tamaño de localización. Esta diferencia podría quizás deberse a la dimensionalidad del sistema, la cual es 1D en las simulaciones y 3D en los experimentos.

Comparando el decaimiento de los ecos con el crecimiento del número de espines correlacionados en el sistema, se observó una correlación entre el tamaño de cluster inicial K_0 y el tiempo de transición entre régimen gaussiano a exponencial t_c . Se observa que el tiempo t_c decrece para $K_0 \lesssim 4$ y permanece constante a partir de $K_0 \sim 4$. Esto parece indicar que el tiempo de transición t_c está relacionado a la velocidad de crecimiento del cluster de espines correlacionados que cambia en $K_0 \sim 4$.

Finalmente se reanalizaron los datos experimentales utilizando los resultados y nuevas interpretaciones de este trabajo. Se ajustó la tasa de decoherencia determinada experimentalmente en función de la perturbación para distintos tamaños del cluster inicial mediante la ecuación (6.10) y una *pseudo-Huber loss function* (6.11) que describen comportamientos similares. Se observa que la desviación en los ajustes (STD) es aproximadamente la misma para ambos y que los parámetros son del mismo orden, sin embargo la ecuación (6.10), al tener un modelo detrás, donde cada parámetro está

asociado a un tipo de decaimiento brinda más información.

Se compararon los valores obtenidos en los ajustes experimentales con los parámetros obtenidos durante la simulación donde se observó que, si bien los sistemas involucrados son muy diferentes, se recuperan los mismos comportamientos cualitativos.

Esto demuestra por un lado, que los datos experimentales pueden ser descritos con estas simulaciones, y que pueden ser mejoradas aumentando la dimensionalidad del sistema. Por otro lado, demostramos que los ecos de reversión temporal manifiestan los cambios dinámicos del crecimiento del número de espines correlacionados por la dinámica cuántica. Esto brinda una herramienta para monitorear la dinámica de estos sistemas complejos de forma más rápida, ya que demanda un número menor de experimentos para cuantificarla.

Apéndice A

Simulaciones numéricas

La evolución temporal de un sistema de espines cuánticos esta determinada por la ecuación de Schödinger dependiente del tiempo, en la cual un operador Hamiltoniano \mathcal{H} contiene la información que define la dinámica (campos externos, interacciones, etc.).

Esta ecuación puede resolverse exactamente encontrando los autovectores y autovalores de \mathcal{H} (diagonalizandolo), para luego expandir el estado a evolucionar $|\phi(t)\rangle$ en términos de dichos autovectores (ó en su defecto, escribir la matriz densidad ρ en esta base) [29]. En esta tesis, esta estrategia fue utilizada para la simulación de las dinámicas (y decaimientos de los ecos) de sistemas de 5 y 6 espines. Sin embargo, éste mecanismo no es posible para sistemas de espines más grandes ($\gtrsim 10$ espines) debido a que la dimensión del espacio de Hilbert crece exponencialmente 2^N con el número de espines N del sistema, y junto con esto el costo computacional en memoria para poder realizar esta tarea.

Existen diferentes alternativas que pueden utilizarse para obtener una evolución aproximada de la solución sin recurrir a la diagonalización exacta, que puede ser tan buena como uno quiera. En esta tesis se utilizó un algoritmo basado en el método de Trotter-Suzuki (TS), el cual preserva la unitariedad de la evolución (conserva probabilidades), y se basa en aproximar el operador evolución mediante una secuencia de operadores de evolución adecuadamente elegidos y que uno sabe diagonalizarlos [46, 47].

Para realizar las simulaciones con más de 6 espines en esta tesis se utilizó un algoritmo Fortran de TS para sistemas de espines (implementado por Fernando Cucchiatti) el cual se describe en la siguiente sección de este apéndice combinado con una técnica basada en el paralelismo cuántico para simular matrices densidad. Este último es descrito en la segunda sección de este apéndice.

A.1. Algoritmo de Trotter-Suzuki

En esta sección se resume el algoritmo utilizado, basado en la Ref.[47]. El mismo es implementado para la dinámica de espines 1/2 y se conoce como descomposición XYZ.

Consideremos el Hamiltoniano de espín:

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} h_j^\alpha I_j^\alpha + \sum_{j,k=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} J_{j,k}^\alpha I_j^\alpha I_k^\alpha, \quad (\text{A.1})$$

donde I_j^α es el operador de espín en el sitio j y proyección $\alpha = x, y, z$. Los parámetros h_j^α describen campos locales y $J_{j,k}^\alpha$ son las constantes de acoplamiento entre espines.

En nuestro caso, consideramos $h_j^\alpha = 0 \forall j, \alpha$ y $J_{j,k}^\alpha \propto 1/|j-k|^3$ dependiendo el factor de proporcionalidad de α y el Hamiltoniano a describir $(\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_d, \mathcal{H}_p)$. Sin embargo a continuación será tratado de forma general.

Asumamos que el sistema de N espines esta descripto por un estado,

$$|\Phi_0\rangle = \sum_{i=1}^{2^N} c_i |\beta_i\rangle, \quad (\text{A.2})$$

expandido en la base de Ising $(|\beta_i\rangle)$, productos tensoriales de los autovectores de cada I_j^z y c_i coeficientes complejos. El estado del sistema a tiempo t será $|\Phi_t\rangle = U(t) |\Phi_0\rangle = e^{-it\mathcal{H}} |\Phi_0\rangle$.

La idea del algoritmo es encontrar una descomposición de \mathcal{H} que provea un conjunto de evoluciones simples que aproximen la evolución exacta $U(t)$. Si, $\mathcal{H} = \sum_{i=1}^K \mathcal{H}_i$, entonces

$$U(t) = e^{-it\mathcal{H}} = e^{-it\sum_{i=1}^K \mathcal{H}_i} = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^K e^{-it\mathcal{H}_i/m} \right)^m, \quad (\text{A.3})$$

lo cual a primer orden es,

$$U(t) \simeq U_1(t) = e^{-it\mathcal{H}_1} \dots e^{-it\mathcal{H}_K}, \quad (\text{A.4})$$

y a segundo y cuarto orden (utilizado para las simulaciones de la tesis):

$$U_2(t) = U_1^\dagger(-t/2)U_1(t/2), \quad (\text{A.5})$$

$$U_4(t) = U_2(at)U_2(at)U_2((1-4a)t)U_2(at)U_2(at), \quad (\text{A.6})$$

donde $a = 1/(4 - 4^{1/3})$. Esta aproximación de $U(t)$ es bajo la condición de que t sea suficientemente pequeño en comparación con la escala de tiempo más rápida dada por \mathcal{H} . Es decir, los pasos de t deben ser tales que (para el hamiltoniano (A.1)),

$$t \ll \left\{ \max_{j,k} \left[\sum_{\alpha} (h_j^{\alpha}/2)^2 + \sum_{\alpha} (J_{j,k}^{\alpha}/4)^2 \right]^{1/2} \right\}^{-1}. \quad (\text{A.7})$$

La descomposición utilizada para el hamiltoniano (A.1) viene dada por los términos de un espín I_j^{α} y los términos de interacciones espín-espín $I_j^{\alpha} I_k^{\alpha}$. Cada uno de ellos se rota adecuadamente para obtener su representación diagonal. Por esta razón, consideremos los operadores $R_{\pi/2,j}^y$ y $R_{-\pi/2,j}^x$, los cuales rotan respectivamente a I_j^x e I_j^y a I_j^z . Las rotaciones globales se definen mediante los productos, $Y = \otimes_j R_{\pi/2,j}^y$ y $X = \otimes_j R_{-\pi/2,j}^x$.

El objetivo es aplicar solo las evoluciones de fase “diagonales” de la base de Ising. La evolución parcial $e^{-ith_j^{\alpha} I_j^{\alpha}}$ produce una fase trivial (para la implementación) para $\alpha = z$ debido a la base elegida, mientras que para $\alpha = x, y$ se requiere la aplicación de rotaciones.

Tenemos entonces, para las operaciones de un espín,

$$\exp \left\{ -it \left[\sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} h_j^{\alpha} I_j^{\alpha} \right] \right\} \simeq \prod_{\alpha=x,y,z} \exp \left\{ -it \left[\sum_{j=1}^N h_j^{\alpha} I_j^{\alpha} \right] \right\}, \quad (\text{A.8})$$

donde para las operaciones donde las exponenciales no involucran operadores en z deben rotarse.

De la misma manera,

$$\exp \left\{ -it \left[\sum_{j,k=1}^N \sum_{\alpha=x,y,z} J_{j,k}^{\alpha} I_j^{\alpha} I_k^{\alpha} \right] \right\} \simeq \prod_{\alpha=x,y,z} \exp \left\{ -it \left[\sum_{j,k=1}^N J_{j,k}^{\alpha} I_j^{\alpha} I_k^{\alpha} \right] \right\}, \quad (\text{A.9})$$

donde nuevamente los términos en z involucran operadores diagonales y los restantes deben rotarse.

A.2. Paralelismo cuántico como una herramienta para simular ensamble de espines

El algoritmo anterior, nos proporciona una manera rápida de evolucionar funciones de onda, lo cual en principio nos permitiría realizar la evolución de un ensamble de ellas evolucionando cada elemento de la base del ensamble y promediando adecuadamente. Esto utilizaría mucho menor memoria a la necesaria para utilizar la matriz densidad, ya que tenemos un número de elementos 2^N menor. Sin embargo, evolucionar las 2^N funciones de onda de un ensamble tipo térmico, como es el caso en RMN, tiene un costo temporal muy alto. Por esta razón, solo se recurrió a este método para sistemas de 7, 8 y 9 espines que necesitaban un tiempo de cómputo razonable. Para espines de tamaños

mayores, de 10 a 18 se utilizó un método basado en el paralelismo cuántico [44], el cual permite simular la dinámica de un ensamble, bajo ciertas condiciones, mediante la evolución de un número pequeño de funciones de onda adecuadamente construidas. A continuación se resume el método tal como se describe en [44].

Si la condición inicial y el observable son “locales”, cuando se evalúa un estado dado por una superposición con fases aleatorias de todos los elementos del ensamble, estos observables se vuelven *auto-promediados* (*self-averaging*). Tomemos un ensamble de todos los estados $|\Psi_i^m\rangle = |\phi_m\rangle \otimes |\Psi_i\rangle$, donde hay m espines en el estado $|\phi_m\rangle$ y el resto $(N - m)$ están en $|\Psi_i\rangle$. La probabilidad de encontrar a tiempo t , m' espines en el estado $|\phi_{m'}\rangle$ si al tiempo $t = 0$ había m espines en $|\phi_m\rangle$, viene dada por

$$W_{m',m}^{ens}(t) = \sum_{f=1}^{2^{M-m'}} \sum_{i=1}^{2^{M-m}} p_i \left| \langle \Psi_f^{m'} | e^{-i\mathcal{H}t} | \Psi_i^m \rangle \right|^2, \quad (\text{A.10})$$

donde se suma sobre todos los posibles estados iniciales y finales.

Como caso particular y ejemplo podemos tomar $m = m' = 1$, $|\phi_m\rangle = |\uparrow\rangle_n$ el estado correspondiente a el n -esimo espín up y $|\phi_{m'}\rangle = |\uparrow\rangle_{n'}$ correspondiente al n' -esimo espín. La polarización del espín n' a tiempo t , estando el espín n “up” a tiempo cero esta dada por $P_{n,n'}^{ens} = 2[W_{1,1}^{ens} - 1/2]$, expresión utilizada en este trabajo para $n = n'$ como condición localizada.

La expresión (A.10) implica la evolución de $D = 2^{M-m}$ estados, el paralelismo cuántico sugiere que la función de correlación deseada está contenida en la dinámica de un estado puro, este estado se construye mediante un superposición de todas las componentes del ensamble,

$$\Psi_{m,m'}^\alpha = \sum_{i=1}^{\alpha} \alpha_i |\Psi_i^m\rangle, \quad (\text{A.11})$$

donde $\alpha_i = \sqrt{p_i} e^{i\varphi}$, con φ aleatorio. La función de correlación viene dada entonces por,

$$W_{m',m}^{\{\alpha\}}(t) = \sum_{f=1}^{D'} \sum_{i=1}^D p_i \left| \langle \Psi_f^{m'} | e^{-i\mathcal{H}t} | \Psi_i^m \rangle \right|^2 \quad (\text{A.12})$$

$$+ \sum_{f=1}^{D'} \sum_{i' \neq i=1}^D \alpha_i \alpha_{i'} * \langle \Psi_i^{m'} | e^{i\mathcal{H}t} | \Psi_f^{m'} \rangle \langle \Psi_f^{m'} | e^{-i\mathcal{H}t} | \Psi_i^m \rangle, \quad (\text{A.13})$$

donde $\{\alpha\}$ denota el set de todos los α_i utilizados en la construcción del estado y $D' = 2^{M-m'}$. Los dos tipos de evolución se esquematizan en la figura A.1.

Se puede observar que el término cruzado es la diferencia entre $W_{m',m}^{ens}(t)$ y $W_{m',m}^\alpha(t)$, y, promediando sobre N_α realizaciones de posibles estados iniciales, tenemos que $W_{m',m}^{ens}(t) = \lim_{N_\alpha \rightarrow \infty} < W_{m',m}^\alpha(t) >_{N_\alpha}$.

Sin embargo, puede demostrarse que, para una distribución homogénea $p_i = 2^{M-m}$,

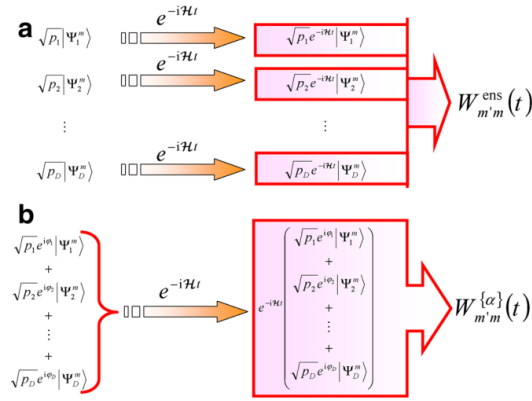


Figura A.1: (a) Esquemas correspondientes a la evolución cuántica de un ensamble y (b) de un estado puro. Imagen tomada de [44].

y condición inicial localizada ($M \gg m$), y M medianamente grande ($M > 9$) uno obtiene $W_{m',m}^{\text{ens}}(t) \approx W_{m',m}^{\alpha}(t)$ en una única realización.

Bibliografía

- [1] Suter, D., Álvarez, G. A. Colloquium: Protecting quantum information against environmental noise. *Reviews of Modern Physics*, **88** (4), 041001, 2016. [1](#), [5](#), [37](#)
- [2] Zoller, P., Beth, T., Binosi, D., Blatt, R., Briegel, H., Bruss, D., *et al.* Quantum information processing and communication. *The European Physical Journal D-Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, **36** (2), 203–228, 2005. [1](#)
- [3] Álvarez, G. A., Shemesh, N., Frydman, L. Internal gradient distributions: A susceptibility-derived tensor delivering morphologies by magnetic resonance. *Scientific Reports*, **7**, 2017. [1](#), [5](#)
- [4] Shemesh, N., Álvarez, G. A., Frydman, L. Measuring small compartment dimensions by probing diffusion dynamics via non-uniform oscillating-gradient spin-echo (nogse) nmr. *Journal of Magnetic Resonance*, **237** (Supplement C), 49 – 62, 2013.
- [5] Ong, H. H., Wright, A. C., Wehrli, S. L., Souza, A., Schwartz, E. D., Hwang, S. N., *et al.* Indirect measurement of regional axon diameter in excised mouse spinal cord with q-space imaging: simulation and experimental studies. *Neuroimage*, **40** (4), 1619–1632, 2008. [1](#)
- [6] Alvarez, G. A., Suter, D. Localization effects induced by decoherence in superpositions of many-spin quantum states. *Physical Review A*, **84** (1), 012320, 2011. [1](#), [2](#), [3](#), [5](#), [29](#), [37](#), [38](#), [40](#), [75](#)
- [7] Krojanski, H. G., Suter, D. Scaling of decoherence in wide nmr quantum registers. *Physical review letters*, **93** (9), 090501, 2004. [5](#), [17](#), [37](#), [38](#), [52](#)
- [8] Sánchez, C. M., Pastawski, H. M., Levstein, P. R. Time evolution of multiple quantum coherences in nmr. *Physica B: Condensed Matter*, **398** (2), 472 – 475, 2007.
- [9] Pastawski, H., Levstein, P., Usaj, G., Raya, J., Hirschinger, J. A nuclear magnetic resonance answer to the boltzmann–loschmidt controversy? *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **283** (1), 166 – 170, 2000. [1](#), [37](#)

- [10] Zurek, W. H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. *Reviews of Modern Physics*, **75**, 2003. [1](#), [37](#)
- [11] Álvarez, G. A., Suter, D., Kaiser, R. Localization-delocalization transition in the dynamics of dipolar-coupled nuclear spins. *Science*, **349** (6250), 846–848, 2015. [1](#), [2](#), [3](#), [5](#), [29](#), [33](#), [38](#), [40](#), [52](#), [54](#), [64](#), [75](#)
- [12] Semeghini, G., Landini, M., Castilho, P., Roy, S., Spagnolli, G., Trenkwalder, A., *et al.* Measurement of the mobility edge for 3d anderson localization. *Nature Physics*, **11** (7), 554–559, 2015.
- [13] Jendrzejewski, F., Bernard, A., Mueller, K., Cheinet, P., Josse, V., Piraud, M., *et al.* Three-dimensional localization of ultracold atoms in an optical disordered potential. *Nature Physics*, **8** (5), 398–403, 2012. [1](#)
- [14] Pomeransky, A. A., Shepelyansky, D. L. Quantum computation of the anderson transition in the presence of imperfections. *Phys. Rev. A*, **69**, 014302, Jan 2004. [1](#)
- [15] Allcock, J., Linden, N. Quantum communication beyond the localization length in disordered spin chains. *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 110501, Mar 2009. [1](#)
- [16] Zwick, A., Álvarez, G. A., Bensky, G., Kurizki, G. Optimized dynamical control of state transfer through noisy spin chains. *New J. Phys.*, **16** (6), 065021, jun. 2014. [1](#)
- [17] Zwick, A., Álvarez, G. A., Stolze, J., Osenda, O. Robustness of spin-coupling distributions for perfect quantum state transfer. *Phys. Rev. A*, **84** (2), 022311, 2011. [2](#)
- [18] Zwick, A., Álvarez, G. A., Stolze, J., Osenda, O. Spin chains for robust state transfer: Modified boundary couplings versus completely engineered chains. *Phys. Rev. A*, **85** (1), 012318, ene. 2012.
- [19] Stolze, J., Álvarez, G. A., Osenda, O., Zwick, A. Robustness of spin-chain state-transfer schemes. En: G. M. Nikolopoulos, I. Jex (eds.) Quantum State Transfer and Quantum Network Engineering, Quantum Science and Technology Series. Berlin: Springer, 2014. [2](#)
- [20] Comunicación privada con g. a. Álvarez. datos sin publicar. [2](#), [41](#), [60](#), [64](#), [70](#)
- [21] Morris, P. Nuclear magnetic resonance imaging in medicine and biology. Clarendon Press, 1986. [5](#)
- [22] Callaghan, P. T. Principles of Nuclear Magnetic Resonance Microscopy. Oxford Science Publications, 1993.

- [23] Jackman, L. M., Sternhell, S. Applications of Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy in Organic Chemistry. Pergamon, 1969. [5](#)
- [24] Cory, D. G., Laflamme, R., Knill, E., Viola, L., Havel, T., Boulant, N., *et al.* Nmr based quantum information processing: Achievements and prospects. *Fortschritte der Physik: Progress of Physics*, **48** (9-11), 875–907, 2000. [5](#)
- [25] Georgescu, I. M., Ashhab, S., Nori, F. Quantum simulation. *Reviews of Modern Physics*, **86** (1), 153, 2014.
- [26] Cory, D. G., Fahmy, A. F., Havel, T. F. Ensemble quantum computing by nmr spectroscopy. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **94** (5), 1634–1639, 1997. [5](#)
- [27] Alvarez, G. A., Danieli, E. P., Levstein, P. R., Pastawski, H. M. Decoherence as attenuation of mesoscopic echoes in a spin-chain channel. *Physical Review A*, **82** (1), 012310, 2010. [5](#)
- [28] Slichter, C. P. Principles of magnetic resonance, tomo 1. Springer Science & Business Media, 2013. [6](#), [7](#), [8](#), [9](#), [10](#), [11](#), [12](#), [17](#)
- [29] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F. Quantum mechanics. Wiley, 1977. [8](#), [14](#), [81](#)
- [30] Bloch, F. Nuclear induction. *Physical review*, **70** (7-8), 460, 1946. [10](#)
- [31] Haeberlen, U. High Resolution NMR in Solids Selective Averaging. Academic Press, 1976. [12](#), [17](#)
- [32] Goussev, A., Jalabert, R. A., Pastawski, H. M., Wisniacki, D. A. Loschmidt echo. *Scholarpedia*, **7** (8), 11687, 2012. Revision #127578. [13](#), [17](#)
- [33] Blum, K. Density matrix theory and applications, tomo 64. Springer Science & Business Media, 2012. [14](#), [15](#)
- [34] Álvarez, G. A. Interferencias Cuánticas en la Dinámica de los espines observada por RMN. Proyecto Fin de Carrera, Universidad nacional de Cordoba - Facultad de Matemática, Astronomía y Física, 2002. [15](#), [19](#)
- [35] Hahn, E. L. Spin echoes. *Phys. Rev.*, **80**, 580–594, 1950. [17](#)
- [36] Rhim, W. K., Pines, A., Waugh, J. S. Time-reversal experiments in dipolar-coupled spin systems. *Physical Review B*, **3** (3), 1971. [17](#)
- [37] Levitt, M. H. Spin Dynamics Basics of Nuclear Magnetic Resonance. Wiley, 2008. [17](#)

- [38] Baum, J., Munowitz, M., Garroway, A., Pines, A. Multiple-quantum dynamics in solid state nmr. *The Journal of chemical physics*, **83** (5), 2015–2025, 1985. [17](#), [28](#), [31](#), [34](#)
- [39] Jordan, P., Wigner, E. P. über das paulische äquivalenzverbot. págs. 109–129, 1993. [18](#)
- [40] Müller, L., Kumar, A., Baumann, T., Ernst, R. R. Transient oscillations in nmr cross-polarization experiments in solids. *Phys. Rev. Lett.*, **32**, 1402–1406, Jun 1974. [19](#)
- [41] Hartmann, S. R., Hahn, E. L. Nuclear double resonance in the rotating frame. *Physical Review*, **128** (5), 1962. [20](#)
- [42] Munowitz, M., Pines, A. Principles and applicatios of multiple-quantum NMR. John Wiley and Sons, Inc., 1987. [26](#), [27](#), [28](#), [34](#)
- [43] Doronin, S., Maksimov, I., Fel’dman, E. Multiple-quantum dynamics of one-dimensional nuclear spin systems in solids. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **91** (3), 597–609, 2000. [30](#), [32](#), [76](#)
- [44] Álvarez, G. A., Danieli, E. P., Levstein, P. R., Pastawski, H. M. Quantum parallelism as a tool for ensemble spin dynamics calculations. *Physical review letters*, **101** (12), 120503, 2008. [34](#), [52](#), [77](#), [84](#), [85](#)
- [45] Álvarez, G. A., Suter, D. Nmr quantum simulation of localization effects induced by decoherence. *Physical Review Letters*, **104** (23), 230403, 2010. [37](#), [38](#), [52](#), [54](#), [67](#), [72](#), [73](#), [78](#)
- [46] De Raedt, H., De Raedt, B. Applications of the generalized trotter formula. *Phys. Rev. A*, **28**, 3575–3580, Dec 1983. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.28.3575>. [52](#), [77](#), [81](#)
- [47] De Raedt, H., Michielsen, K. Computational methods for simulating quantum computers. *arXiv preprint quant-ph/0406210*, 2004. [52](#), [77](#), [81](#), [82](#)
- [48] Flambaum, V., Izrailev, F. Unconventional decay law for excited states in closed many-body systems. *Physical Review E*, **64** (2), 026124, 2001. [57](#)
- [49] Zobov, V. V. zobov and a. lundin, jetp 103, 904 (2006). *JETP*, **103**, 904, 2006. [66](#)

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi familia, ya que sin su apoyo, educación y afecto incondicional no hubiese podido cumplir (ó quizás tener) estos objetivos. Quiero hacer particular el agradecimiento a Raqui, Ari, Miguel y Abuelo Miguel quienes hasta el día de hoy continúan a mi lado, y a Ioio, Oti y Haydé que aunque no estén para recibir el agradecimiento me gustaria plasmarlo. A Ioio y Oti quisiera agradecerles infinitas cosas, infinitas, fueron son y serán una inspiración para mi. A Haydé si bien nuestra relación no fue tan cercana estoy seguro de que siempre quisiste lo mejor para mi y que estarías organizando un viaje para la graduación.

Quiero agradecerle a Lourdes, por aguantarme estos casi 6 años, acompañarme y apoyarme en toda la carrera incluso si eso implicaba estar a 1500 km de distancia.

En el ámbito académico quiero agradecer a todas las instituciones que me acogieron desde la excelentísima Escuela Fiscal N° 398, el Instituto Jose Manuel Estrada, la Universidad Nacional de Rosario la cual me brindo una sólida base de física y matemática, y finalmente al Instituto Balseiro que junto con la primer institución son a los que más afecto les tengo. En cuanto a docentes no voy a hacer menciones particulares, pues son muchos y sería injusto si olvido a alguien, ya que de todos aprendí en mayor o menor medida.

A Fabian quien antes de ser docente fue familiar y en ambas situaciones logró motivarme a estudiar física y hacer experimentos, pero, lamentablemente para el, no a tomar mate.

A Gonzalo y Analía, por ser excelentes directores, personas, trabajadores incansables y hacer esta tesis viable. Gracias por las 10^n correcciones (con $n \gg 10$). Al grupo de investigación, en constante expansión, por estar siempre dispuestos a ayudar, discutir y empujar para el mismo lado.

Gracias a la CNEA por su apoyo económico estos últimos dos años y medio.

Y finalmente gracias a todos mis amigos y compañeros, quienes son una parte importante de mi vida. Particularmente gracias a Nacho, Nico, Pichu, Bruno, Iri y Gian con quienes a la distancia sigo teniendo una profunda amistad. Y, a quienes fueron indispensables en mi paso por el IB (y un par la UNR), Mile, Puig, Jorge, Feli, Marco, Raimel, Paco, Agus, LDMDP, y la kovabanda (Kova, Jime, Lucas), sumando cada uno, al menos un capítulo de buenas anécdotas (al menos en retrospectiva).

